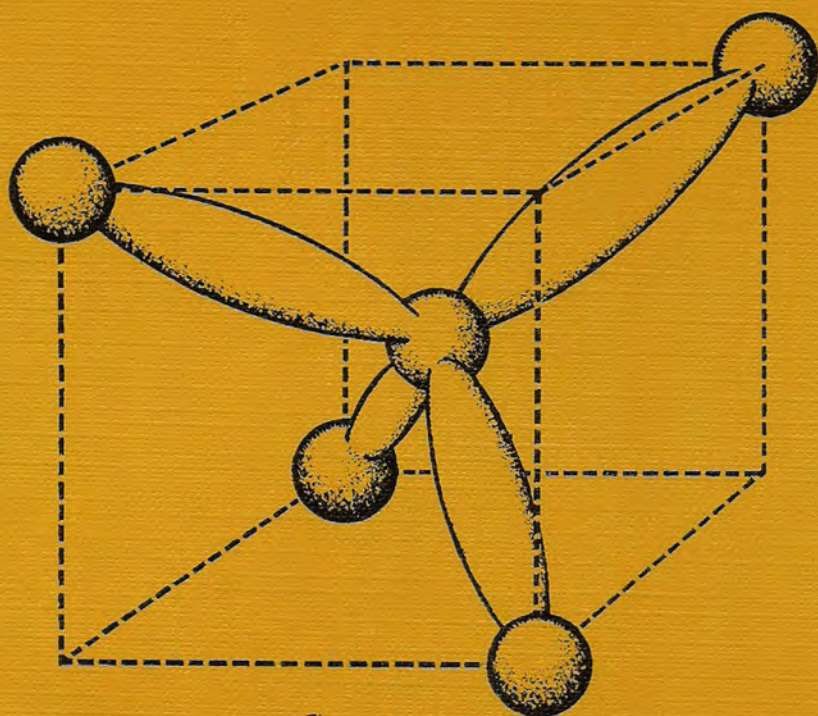
HILTON ANDRADE DE MELLO
RONALDO SÉRGIO DE BIASI

INTRODUÇÃO À FÍSICA DOS SEMICONDUTORES

MEC

INTRODUÇÃO À FÍSICA DOS SEMICONDUTORES

FICHA CATALOGRÁFICA

(Preparada pelo Centro de Catalogação-na-fonte, Câmara Brasileira do Livro, SP)

Melo, Hilton Andrade de.

M485i Introdução à física dos semicondutores |por| Hilton Andrade de Mello |e| Ronaldo Sérgio de Biasi. São Paulo, Edgard Blücher; Brasília, INL, 1975.

p. ilust.

Bibliografia.

1. Semicondutores I. Biasi, Ronaldo Sérgio de, 1943– II. Instituto Nacional do Livro. III. Título.

CDD: 537.622

CCF/CBL/SP–75–1026 CDU: 536.311

Índice para catálogo sistemático (CDD):

1. Semicondutores: Física 537.622

Eng.º HILTON ANDRADE DE MELLO

Engenheiro Eletrônico e Nuclear; Eng.º pela Stanford University, California, EUA; Chefe do Laboratório de Instrumentação e Controle do Instituto de Engenharia Nuclear

Ph. D. RONALDO SÉRGIO DE BIASI

Engenheiro Eletrônico; Ph. D. pela University of Washington, Washington, EUA; Professor de Física do Estado Sólido do Instituto Militar de Engenharia

INTRODUÇÃO À FÍSICA DOS SEMICONDUTORES

EDITORA EDGARD BLUCHER LTDA.

EM CONVÊNIO COM O INSTITUTO NACIONAL DO LIVRO – – MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO E CULTURA

A nossas esposas

MARIA DE PAULA
e
MARÍLIA

Conteúdo

Introdução IX
Constantes físicas XI
Parâmetros de alguns semicondutores a 27 °C XII

1. Considerações clássicas sobre a estrutura atômica 1
2. Noções básicas de mecânica quântica 8
3. Aplicações da mecânica quântica 13
4. Noções de cristalografia 27
5. Aplicação da mecânica quântica a um cristal 42
6. Propriedades básicas dos materiais semicondutores 49
7. Distribuições estatísticas 61
8. Aplicação da distribuição de Fermi-Dirac a um material semicondutor 70
9. Transporte de cargas nos semicondutores 83
10. Junções *PN* 93
11. Transistores de junção 107
12. Outros fenômenos observados nos semicondutores 114

Apêndices

A. Teorema de Bloch 119
B. Experiências em semicondutores 121

Respostas e sugestões para os exercícios propostos 123

Introdução

Desde a invenção do transistor, o estudo da Eletrônica tem-se concentrado cada vez mais no projeto e utilização dos dispositivos semicondutores. Em conseqüência, passou-se a exigir do estudante de Eletrônica um conhecimento das propriedades básicas da matéria que até então não era realmente necessário para sua profissão.

Ao mesmo tempo, o estudo dos materiais semicondutores foi incluído no currículo das escolas de Física, como uma aplicação de grande interesse prático dos conceitos abstratos da Física do Estado Sólido.

Neste livro, que foi escrito tendo em vista tanto os estudantes de Eletrônica como os de Física, procuramos relacionar as propriedades básicas dos dispositivos semicondutores aos conceitos fundamentais da Mecânica Quântica e da Física do Estado Sólido.

O Cap. 1 é uma introdução histórica à teoria eletrônica da matéria; as noções fundamentais de Mecânica Quântica são apresentadas no Cap. 2.

No Cap. 3 são discutidas duas aplicações importantes da Mecânica Quântica: o estudo da estrutura eletrônica dos átomos e o estudo do Gás de Fermi.

Os conceitos de cristalografia necessários aos estudo dos sólidos são expostos no Cap. 4; no Cap. 5, estudamos a aplicação dos princípios de Mecânica Quântica a um sólido cristalino, surgindo naturalmente o conceito de faixas de energia permitidas e faixas proibidas.

O Cap. 6 é dedicado ao estudo das propriedades básicas dos materiais semicondutores; nesse capítulo são definidos e discutidos os conceitos de ligação covalente, buraco, recombinação, impureza, energia de ionização e massa efetiva.

As distribuições estatísticas, essenciais para a compreensão dos fenômenos coletivos nos sólidos, são examinadas no Cap. 7; no Cap. 8, a distribuição de Fermi-Dirac é aplicada a um material semicondutor, como meio para calcular as concentrações de elétrons e buracos.

O Cap. 9 trata dos fenômenos de transporte nos semicondutores, introduzindo os conceitos de mobilidade e difusão.

Os Caps. 10 e 11 mostram que os conceitos desenvolvidos nos capítulos anteriores podem ser aplicados diretamente aos dois dispositivos semicondutores mais usados na prática: os diodos semicondutores (Cap. 10) e os transistores de junção (Cap. 11).

O Cap. 12 trata de alguns fenômenos importantes que não foram discutidos nos capítulos anteriores: Luminescência, Efeito Túnel e Efeito Hall.

O Teorema de Bloch, essencial para a compreensão dos fenômenos de condução nos sólidos, é demonstrado no Apêndice A; o Apêndice B é uma lista de referências a experiências simples que ilustram os fenômenos estudados neste livro.

No final de cada capítulo, o leitor encontrará uma série de exercícios. As respostas ou sugestões para alguns exercícios — assinalados com um asterisco — se encontram no final do livro.

Queremos expressar nossos agradecimentos a todos que colaboraram conosco, em especial ao físico Luiz Telmo Auler por seus comentários e sugestões, ao Sr. Luis Antonio Costa Ferreira pela cuidadosa execução das ilustrações, e à Srta. Eneida A. Mendonça pelo excelente trabalho de datilografia dos originais.

H. A. M.
R. S. B.

CONSTANTES FÍSICAS

Símbolo	Nome	Valor e unidade
Gerais		
c	velocidade da luz no vácuo	$2{,}998 \times 10^{8}$ m/s
L	número de Loschmidt	$2{,}69 \times 10^{25}$ m^{-3}
N_0	número de Avogadro	$6{,}0225 \times 10^{23}$ mol^{-1}
k	constante de Boltzmann	$1{,}381 \times 10^{-23}$ J/K
Atômicas		
h	constante de Planck	$6{,}626 \times 10^{-34}$ J-s
$\hbar$	$h/2\pi$	$1{,}054 \times 10^{-34}$ J-s
a_0	raio de Bohr	$5{,}292 \times 10^{-11}$ m
Elétricas		
ϵ_0	permissividade do vácuo	$8{,}854 \times 10^{-12}$ F/m
μ_0	permeabilidade do vácuo	$1{,}257 \times 10^{-6}$ H/m
Partículas		
m_e	massa de repouso do elétron	$9{,}108 \times 10^{-31}$ kg
M_p	massa de repouso do próton	$1{,}672 \times 10^{-27}$ kg
M_n	massa de repouso do nêutron	$1{,}675 \times 10^{-27}$ kg
q	valor absoluto da carga do elétron	$1{,}601 \times 10^{-19}$ C
Gases		
R_0	constante dos gases perfeitos	8,31 J/mol-K

PARÂMETROS DE ALGUNS SEMICONDUTORES A 27 °C

	Ge	Si	GaAs
Densidade (átomos/cm^3)	$4{,}42 \times 10^{22}$	$5{,}00 \times 10^{22}$	$2{,}21 \times 10^{22}$
Constante da rede (nm)	0,556	0,543	0,565
Massa especifica (g/cm^3)	5,32	2,33	5,32
Largura da faixa proibida (eV)	0,67	1,11	1,40
Concentração intrínseca (portadores/cm^3)	$2{,}40 \times 10^{13}$	$1{,}45 \times 10^{10}$	$9{,}00 \times 10^{6}$
Mobilidade ($cm^2/V \cdot s$):			
Elétrons	3 900	1 350	8 600
Buracos	1 900	480	250
Constante dielétrica	16,3	11,7	12,0
Densidade efetiva de estados:			
Faixa de condução: N_c (cm^{-3})	$1{,}04 \times 10^{19}$	$2{,}80 \times 10^{19}$	$4{,}70 \times 10^{17}$
Faixa de valência: N_v (cm^{-3})	$6{,}00 \times 10^{18}$	$1{,}04 \times 10^{19}$	$7{,}00 \times 10^{18}$

1 Considerações clássicas sobre a estrutura atômica

No início deste século, não havia unanimidade entre os cientistas a respeito da estrutura dos átomos. Thomson (1907)[*] propôs um modelo segundo o qual as partículas positivas e negativas estariam uniformemente distribuídas em todo o átomo.

Experiências realizadas com partículas alfa (núcleos de hélio) emitidas por uma substância radioativa mostraram que essas partículas sofrem um desvio quando atravessam uma lâmina fina de ouro ou prata. O desvio é chamado de *espalhamento*. De acordo com o modelo de Thomson, o ângulo de espalhamento, $\varnothing$, deveria ser sempre menor que 90°, como na Fig. 1.1 (a).

Entretanto, as experiências de Geiger e Marsden (1909) mostraram que algumas das partículas alfa sofrem um desvio maior que 90°, como na Fig. 1.1 (b).

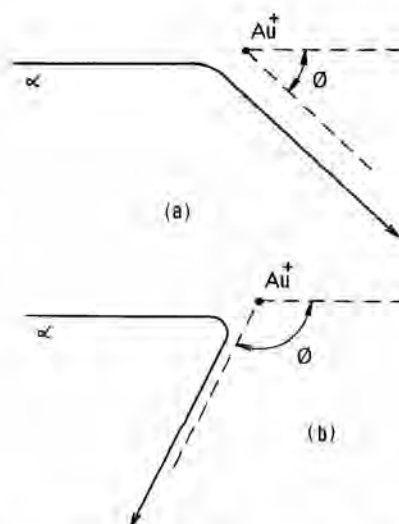



Figura 1.1 Espalhamento de partículas alfa: (a) ângulo $\varnothing < 90°$; (b) ângulo $\varnothing > 90°$

Para explicar esse fato, Rutherford (1911) sugeriu que as partículas que constituem o átomo não estão uniformemente distribuídas, mas que toda a carga positiva está concentrada em uma região central (núcleo), enquanto que a carga negativa está distribuída em torno da região central.

Posteriormente, verificou-se que a região central do átomo (núcleo) é constituída por dois tipos diferentes de partículas, o próton, que possui uma carga elétrica positiva, e o nêutron, que não possui carga elétrica. As cargas negativas distribuídas em torno do núcleo foram associadas às partículas chamadas elétrons, que possuem carga elétrica negativa. As cargas e massas dos três tipos de partículas estão indicadas na Tab. 1.1.

[*]No final do capítulo o leitor pode encontrar a referência completa

Tabela 1.1

Partícula	Massa	Carga elétrica
Elétron	$m_e = 9{,}1083 \times 10^{-31}$ kg	$-1{,}609 \times 10^{-19}$ coulomb
Nêutron	$M_n = 1838{,}65\ m_e$	0
Próton	$M_p = 1836{,}12\ m_e$	$+1{,}609 \times 10^{-19}$ coulomb

O átomo em seu estado normal é eletricamente neutro; como a carga do próton tem o mesmo valor numérico que a carga do elétron, o número de elétrons em um átomo deve ser igual ao número de prótons no núcleo. Esse número é chamado de número atômico e representado pela letra Z. A soma do número de prótons e do número de nêutrons é chamada de número de massa e representada pela letra M. Sem nos preocuparmos com a distribuição dos elétrons em torno do núcleo, podemos representar esquematicamente um átomo como na Fig. 1.2.

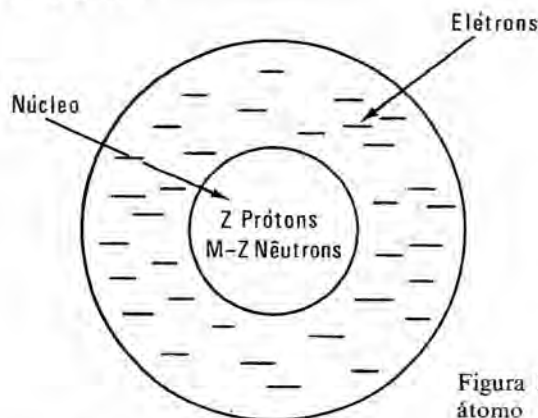



Figura 1.2 Representação esquemática de um átomo

Nosso próximo passo será o estudo da distribuição dos elétrons em torno do núcleo. Antes, porém, convém mencionar um outro fenômeno, estudado por Planck, cuja explicação serviu de base para a formulação de duas importantes teorias: a teoria da emissão fotoelétrica de Einstein e a teoria do espectro do hidrogênio de Bohr. Trata-se do estudo da distribuição da energia irradiada por um corpo negro[*] em função do comprimento de onda da radiação (Rayleigh, 1900 – Jeans, 1905). Quando o problema do corpo negro é resolvido utilizando-se a teoria eletromagnética clássica, chega-se à conclusão de que a intensidade da radiação do corpo negro deve variar inversamente com a quarta potência do comprimento de onda. Na Fig. 1.3 vemos os resultados previstos usando a teoria eletromagnética clássica e os resultados experimentais.

A fórmula de Rayleigh-Jeans concorda com os dados experimentais para grandes comprimentos de onda, mas conduz a resultados absurdos para pequenos comprimentos de onda. Planck (1901) verificou que admitindo que o corpo

[*]Corpo negro é definido como qualquer corpo cuja emissividade é igual a 1, isto é, que irradia energia com o máximo possível de eficiência. O corpo negro também tem um fator de absorção unitário, isto é, absorve toda a energia que incide sobre ele

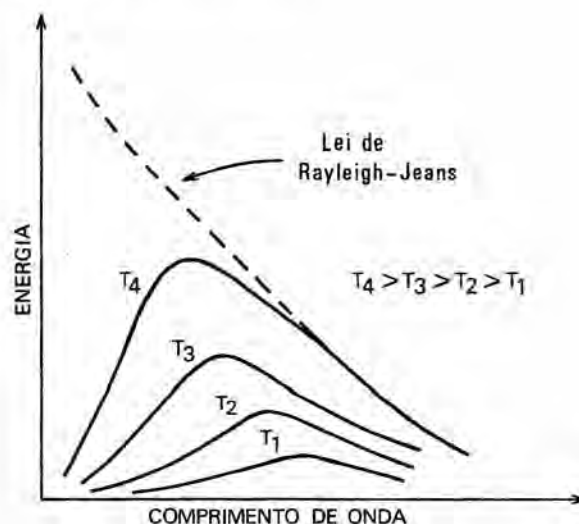



Figura 1.3 Distribuição espectral da energia irradiada pelo corpo negro. A teoria eletromagnética clássica conduz à Lei de Rayleigh-Jeans, segundo a qual $R_\lambda = 2\pi ckT\lambda^{-4}$

negro não irradia continuamente, como a teoria eletromagnética clássica prevê, mas em quanta(*) de energia, cada quantum com uma energia $h\nu$ onde ν é a freqüência da radiação e h uma constante escolhida convenientemente, era possível obter uma boa concordância com os dados experimentais. Planck atribuiu a h o valor de $6{,}55 \times 10^{-27}$ erg-s.

É evidente que uma proposição arbitrária como a de Planck, que contrariava a estabelecida teoria eletromagnética de Maxwell, não teve grande receptividade por parte dos cientistas da época. Entretanto, Einstein (1905) utilizou a hipótese de Planck para explicar com grande sucesso o fenômeno da emissão fotoelétrica, que consiste na emissão de elétrons por um metal quando este é exposto a uma fonte luminosa(**).

Passemos agora ao estudo do movimento dos elétrons em torno do núcleo. Como o elétron possui uma carga elétrica e está em movimento, deveria, de acordo com a teoria eletrodinâmica clássica, irradiar energia continuamente. Em conseqüência, não existiriam átomos estáveis, ao contrário do que se observa na prática. Essa contradição permaneceu até que Bohr (1913, 1915), contrariando as leis da eletrodinâmica clássica, propôs que o elétron gira em torno do núcleo em órbitas estáveis, nas quais não emite energia eletromagnética. Bohr propôs ainda que as órbitas nas quais o elétron não irradia são *órbitas estacionárias*, tais que o momento angular(***) do elétron é igual a um número

(*)Quanta é o plural de quantum

(**)De acordo com Einstein, o fenômeno fotoelétrico é representado pela equação: $h\nu = mv^2/2 + \phi$, onde $h\nu$ é o quantum da luz, $mv^2/2$ a energia cinética com que o elétron é emitido e ϕ é a função trabalho do material, que corresponde à energia necessária para deslocar o elétron até a superfície do metal

(***)De um modo geral, chamamos de momento angular o momento da quantidade de movimento $(m \cdot \vec{v})$ em relação ao ponto considerado (definido pelo raio vetor $\vec{r}$): momento angular $= m \cdot \vec{v} \times \vec{r}$ (Nessa expressão $\times$ significa produto vetorial)

inteiro de $h/2\pi$, onde h é a mesma constante usada por Planck:

$$\text{momento angular} = mvr = nh/2\pi$$

onde n é um número inteiro.

Finalmente, Bohr introduziu outra hipótese, baseada nos estudos de Planck. Ele supôs que quando o elétron passa de uma órbita de energia E_2 para uma órbita de energia E_1 ($E_2 > E_1$), irradia energia com uma freqüência tal que a relação de Planck é satisfeita, isto é, $E_2 - E_1 = h\nu$.

Vamos aplicar as hipóteses de Bohr ao caso simples do átomo de hidrogênio, que possui apenas um elétron. Suponhamos que esse elétron está descrevendo uma trajetória circular em torno do núcleo (Fig. 1.4).

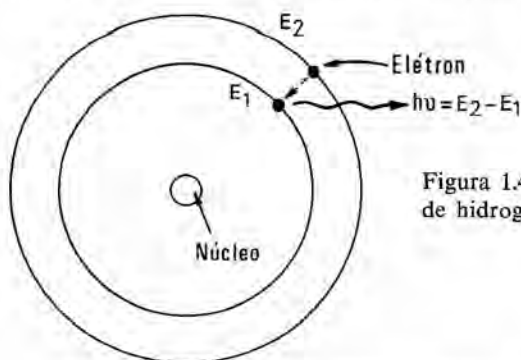



Figura 1.4 Representação esquemática do átomo de hidrogênio

Para que a órbita seja estável, a força de atração que o núcleo exerce sobre o elétron deve ser equilibrada pela força centrífuga resultante do movimento de rotação; isto é(*),

$$\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{q^2}{r^2} = \frac{mv^2}{r}, \qquad \text{(Eq. 1.1)}$$

onde

q é a carga do elétron,
m é a massa do elétron,
v é a velocidade tangencial do elétron,
r é o raio da órbita.

A energia total do elétron é a soma da energia potencial e da energia cinética; isto é,

$$E = E_C + E_P = \frac{mv^2}{2} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{q^2}{r} \qquad \text{(Eq. 1.2)}$$

Vamos agora introduzir a restrição de que o momento angular deve ser um número inteiro de $h/2\pi$:

$$mvr = nh/2\pi \qquad \text{(Eq. 1.3)}$$

(*)O leitor deve observar que estamos usando o sistema MKS *racionalizado*, no qual a força de atração entre duas cargas q_1 e q_2 é dada por $F = q_1q_2/4\pi\epsilon_0 r^2$. Caso estivéssemos usando o sistema *não-racionalizado*, teríamos

$$F = \frac{1}{\epsilon_0}\frac{q_1 q_2}{r^2}$$

De acordo com as Eqs. 1.1, 1.2 e 1.3, temos

$$E = -\frac{mq^4}{8\epsilon_0^2 n^2 h^2}. \quad \text{(Eq. 1.4)}$$

Para duas órbitas 1 e 2, as energias serão dadas por

$$E_1 = -\frac{mq^4}{8\epsilon_0^2 n_1^2 h^2}, E_2 = -\frac{mq^4}{8\epsilon_0^2 n_2^2 h^2}, \quad \text{(Eq. 1.5)}$$

onde os números inteiros n_1 e n_2 caracterizam as duas órbitas.

A diferença de energia entre as duas órbitas é dada por

$$\Delta E = E_2 - E_1 = \frac{mq^4}{8\epsilon_0^2 h^2}\left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}\right) = h\nu. \quad \text{(Eq. 1.6)}$$

Finalmente, a freqüência ν da radiação é dada por

$$\nu = \frac{mq^4}{8\epsilon_0^2 h^3}\left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}\right). \quad \text{(Eq. 1.7)}$$

O resultado anterior, obtido por Bohr, está de pleno acordo com os resultados experimentais. Na verdade, os espectroscopistas já haviam observado o espectro do hidrogênio, chegando a fórmulas empíricas que permitiam prever as radiações monocromáticas emitidas. Essas fórmulas eram usadas para calcular, não o comprimento de onda ou a freqüência, mas o chamado *número de onda* (freqüência da radiação dividida pela velocidade da luz). Rydberg, por exemplo, mostrou que as séries observadas por Lyman, Balmer e Paschen podiam ser enquadradas na fórmula geral seguinte:

$$\text{número de onda} = R\left(\frac{1}{M^2} - \frac{1}{N^2}\right), \quad \text{(Eq. 1.8)}$$

onde M e N são números inteiros e R é a chamada constante de Rydberg ($R = 109{,}737\ cm^{-1}$).

Em termos de números de onda, a expressão obtida por Bohr (Eq. 1.6) pode ser escrita:

$$\text{número de onda} = \frac{mq^4}{8\epsilon_0^2 h^3 c}\left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}\right), \quad \text{(Eq. 1.9)}$$

ou

$$\text{número de onda} = R'\left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}\right) \quad \text{(Eq. 1.10)}$$

onde:

$$R' = \frac{mq^4}{8\epsilon_0^2 h^3 c}$$

A constante R' que aparece na Eq. 1.10 concorda excepcionalmente bem com o valor experimental (R) obtido por Rydberg.

Na Fig. 1.5 ilustramos algumas transições entre órbitas permissíveis para o átomo de hidrogênio.

Neste ponto pode parecer que o problema está completamente resolvido. Entretanto quando o espectro do hidrogênio é examinado com mais cuidado, verifica-se que as linhas previstas pela teoria de Bohr são na realidade compostas

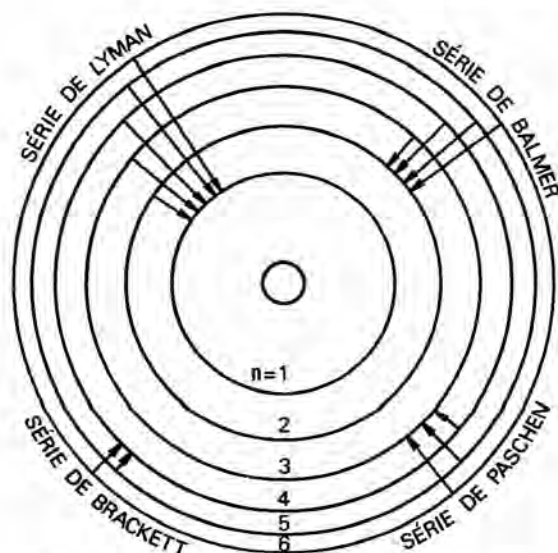



Figura 1.5 Algumas transições correspondentes às linhas do espectro do hidrogênio

de várias linhas muito próximas, que constituem a chamada *estrutura fina do espectro*. Esse desdobramento das linhas do espectro, que não é previsto na teoria original de Bohr, pode ser explicado a partir dos princípios da Mecânica quântica.

EXERCÍCIOS

(*)1.1. Calcule, usando a Eq. 1.4, o raio da órbita de menor energia do átomo de hidrogênio, o chamado raio de Bohr.

(*)1.2. Calcule as freqüências das radiações correspondentes à série de Lyman e à série de Balmer.

REFERÊNCIAS

BOHR, N., "On the Constitution of Atoms and Molecules", *Phil. Mag.* **10**, 91 (1905).

BOHR, N., "On the Quantum Theory of Radiation and the Structure of the Atom", *ibid.*, **30** (1915).

EINSTEIN, A., "Uber einen die Erzengung und Verwandlung des Lichtes be treffenden heuristischen Gesichtspunkt", *Ann. Physik* **17**, 132 (1905).

GEIGER, H. e E. MARSDEN, "On a Diffuse Reflection of the α — Particles", *Proc. Roy. Soc.* **82**, 495 (1909).

GEIGER, H. e E. MARSDEN, "The Laws of Deflection of α — Particles Through Large Angles", *Phil. Mag.* **25**, 604 (1913).

JEANS, J. H., "On the Partition of Energy between Matter and Aether", *Phil. Mag.* **10**, 91 (1905).

(*)As respostas e/ou sugestões para os exercícios em todo o livro, indicados com (*), estão no final do livro

PLANCK, M., "Uber das Gesetz der Energieverteilung in Normalspectrum", *Ann. Physik* **4**, 553 (1901).
RAYLEIGH, J. W., "Remarks upon the Law of Complete Radiation", *Phil. Mag.* **49**, 539 (1900).
RUTHERFORD, E., "The Scattering of α — and β — Particles by Matter and the Structure of the Atom", *Phil. Mag.* **21**, 669 (1911).
THOMSON, J. J., *The Corpuscular Theory of Matter*, (New York: Charles Scribner's Sons, 1907), 103.

BIBLIOGRAFIA

Beiser, A., *Conceitos de Física Moderna* (São Paulo: Editora Polígono, 1969).
Boorse, H. A. e Lloyd Motz, eds., *The World of the Atom* (New York: Basic Books, 1966).
Lopes, J. L., *Introdução à Teoria Atômica da Matéria* (Rio de Janeiro: Ao Livro Técnico, 1959).

2 Noções básicas de mecânica quântica

Como vimos no capítulo anterior, provara-se que a teoria de Bohr continha os fundamentos necessários à solução do problema do espectro dos átomos. Conceitualmente, a maior dificuldade dessa teoria estava associada à própria idéia de quantização, usada por Planck, Einstein e Bohr, esse último quantizando inclusive o momento angular. Qual a justificativa para a hipótese de que a energia e o momento angular tinham que ser múltiplos de uma certa constante? Por que a mecânica clássica resolvia alguns problemas com precisão suficiente, enquanto em outros problemas levava a resultados absurdos? Existiria uma teoria mais geral, da qual a mecânica clássica seria apenas um caso particular?

Um grande passo para resolver essas dificuldades foi dado em 1924, quando de Broglie (1925, 1926) apresentou sua teoria ondulatória da matéria. De acordo com de Broglie, a matéria não é apenas corpuscular, mas qualquer partícula também possui propriedades ondulatórias, sendo caracterizada por um comprimento de onda dado por

$$\lambda = \frac{h}{mv}, \qquad \text{(Eq. 2.1)}$$

onde h é a constante de Planck, m a massa e v a velocidade da partícula.

Essa hipótese de de Broglie não pode ser demonstrada teoricamente, mas Davidson e Germer (1927) mostraram que os elétrons são difratados por uma substância cristalina e os comprimentos de onda observados são exatamente os previstos pela teoria de de Broglie.

É interessante notar que a teoria proposta por de Broglie dá um caráter todo especial às orbitas estacionárias imaginadas por Bohr. De acordo com as Eqs. 1.3 e 2.1, o perímetro da circunferência de uma órbita de Bohr é dado por

$$c = 2\pi r = 2\pi\,\frac{nh/2\pi}{mv} = n\,\frac{h}{mv} = n\lambda \qquad \text{(Eq. 2.2)}$$

Assim a concepção de de Broglie dá às órbitas previstas por Bohr o significado de que a circunferência da órbita é igual a um número inteiro de comprimentos de onda do elétron (onda estacionária). A Fig. 2.1 ilustra esse fato.

Em 1925, Schroedinger criou a Mecânica ondulatória (Schroedinger, 1926), partindo da equação clássica que descreve as ondas estacionárias e usando a concepção de de Broglie para definir o comprimento de onda do elétron. Com isso chegou a uma equação, atualmente conhecida como equação de Schroedinger, que, *convenientemente interpretada*, conduz à solução geral do problema das órbitas dos elétrons.

Na mesma época em que Schroedinger publicou seus trabalhos sobre Mecânica ondulatória, Max Born e Werner Heisenberg criaram a chamada Mecânica matricial(*), que à primeira vista era independente da formulação

(*)A formulação matricial envolve o uso de operadores que geralmente são estudados em cursos mais avançados

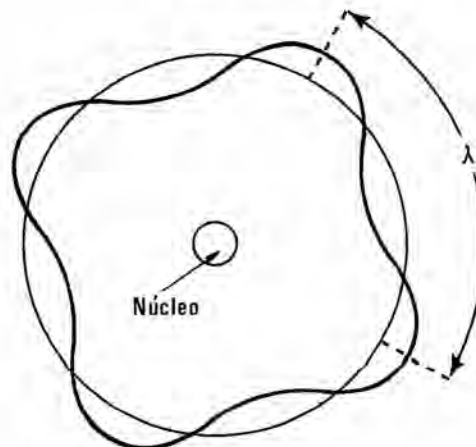



Figura 2.1 Onda estacionária

de Schroedinger. Estudos subseqüentes demonstraram a total equivalência das duas teorias, que atualmente são englobadas sob a designação geral de Mecânica quântica. Neste capítulo adotaremos a formulação de Schroedinger, já que o uso da Mecânica matricial exige uma matemática mais sofisticada.

Do ponto de vista didático, o maior problema do estudo da Mecânica quântica é o caráter postulatório da apresentação. Em outras palavras, a equação de Schroedinger tem como única justificativa o fato de que sua aplicação conduz a resultados teóricos que concordam com os dados experimentais.

Outro ponto que contribui para a dificuldade da Mecânica quântica é o seu caráter probabilístico. Vamos estudar, por exemplo, uma função que se relaciona à probabilidade de encontrarmos um elétron em um determinado *estado*. Na Mecânica quântica nunca sabemos com certeza se o elétron está no estado A ou no estado B; tudo que conhecemos é a probabilidade de que esteja em cada um desses estados.

Schroedinger propôs que o movimento de um elétron submetido a um potencial V obedece à seguinte equação:

$$\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right]\psi(\vec{r},t)-V(\vec{r},t)\psi(\vec{r},t)=\frac{\hbar}{i}\,\frac{\partial\psi(\vec{r},t)}{\partial t}, \qquad \text{(Eq. 2.3)}$$

onde $\hbar = h/2\pi$; x, y e z são as coordenadas do elétron; $\vec{r}$ é o raio vetor que define a posição do elétron; t é o tempo; m é a massa do elétron e $V(\vec{r},t)$ é o potencial a que está submetido o elétron.

A função $\psi(\vec{r},t)$ que aparece na Eq. 2.3 é chamada de *função de onda* do elétron. Como a quantidade $i = \sqrt{-1}$ aparece explicitamente no segundo membro da Eq. 2.3, a função de onda é em geral uma função complexa. Mas isso equivale a dizer que não podemos atribuir-lhe significado físico algum. O que possui significado físico é o *módulo* da função $\psi(\vec{r},t)$. Postula-se(*) que o quadrado do módulo da função de onda representa a densidade de probabilidade —

(*)Não existe qualquer argumento teórico que justifique a interpretação atribuída a $\psi(\vec{r},t)$. Por isso, aconselhamos o leitor a aceitar a Equação de Schroedinger da mesma forma como aceitou a Lei da Gravitação Universal de Newton

probabilidade por unidade de volume e por unidade de tempo — de encontrarmos o elétron entre $\vec{r}$ e $\vec{r} + d\vec{r}$ e entre t e $t + dt$. Em outras palavras, se chamarmos de $p(\vec{r}, t)$ a probabilidade de encontrarmos o elétron entre $\vec{r}$ e $\vec{r} + d\vec{r}$ e entre t e $t + dt$, teremos

$$p(\vec{r}, t) = |\psi(\vec{r}, t)|^2\, dxdydzdt. \qquad \text{(Eq. 2.4)}$$

Se chamarmos de $P(\vec{r}, t)$ a densidade de probabilidade, teremos

$$P(\vec{r}, t) = |\psi(\vec{r}, t)|^2 = \psi(\vec{r}, t) \cdot \psi^*(\vec{r}, t), \qquad \text{(Eq. 2.5)}$$

onde $\psi^*(\vec{r}, t)$ é o complexo conjugado de $\psi(\vec{r}, t)$.

A Eq. 2.3 é a Equação de Schroedinger para o caso geral em que o potencial V é função das coordenadas espaciais e do tempo. Quando o potencial é função apenas das coordenadas espaciais, a equação fica bem mais simples.

Suponhamos que o elétron está submetido a um potencial $V(\vec{r})$ independente do tempo. Nesse caso, podemos usar o método de *separação de variáveis* para resolver a equação diferencial 2.3. A idéia é tentar(*) escrever a função de onda $\psi(\vec{r}, t)$ como produto de duas funções, uma que só depende das coordenadas espaciais, $\psi(\vec{r})$, e outra que só depende do tempo, $T(t)$.

$$\psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}) \cdot T(t). \qquad \text{(Eq. 2.6)}$$

Substituindo a Eq. 2.6 na Eq. 2.3, obtemos

$$\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right]\psi(\vec{r})\,T(t) - V(\vec{r})\,\psi(\vec{r})\,T(t) = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r}) \cdot T(t), \qquad \text{(Eq. 2.7)}$$

ou

$$T(t)\left\{\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right]\psi(\vec{r})\right\} - V(\vec{r})\,\psi(\vec{r})\,T(t) = \frac{\hbar}{i}\psi(\vec{r})\frac{\partial T(t)}{\partial t}, \qquad \text{(Eq. 2.8)}$$

e, finalmente,

$$\frac{-\dfrac{\hbar^2}{2m}\left[\dfrac{\partial^2}{\partial x^2} + \dfrac{\partial^2}{\partial y^2} + \dfrac{\partial^2}{\partial z^2}\right]\psi(\vec{r})}{\psi(\vec{r})} + V(\vec{r}) = -\frac{\hbar}{i}\frac{1}{T(t)}\frac{\partial T(t)}{\partial t}. \qquad \text{(Eq. 2.9)}$$

O primeiro membro da Eq. 2.9 é apenas função das coordenadas espaciais, enquanto o segundo membro é apenas função do tempo. Como não fizemos qualquer restrição à Eq. 2.9, ela deve ser válida para todos os pontos do espaço, em qualquer instante. Para que isso aconteça, é preciso que os dois membros sejam iguais a uma mesma constante. Chamando essa constante de E, devemos ter

$$\frac{-\dfrac{\hbar^2}{2m}\left[\dfrac{\partial^2}{\partial x^2} + \dfrac{\partial^2}{\partial y^2} + \dfrac{\partial^2}{\partial z^2}\right]\psi(\vec{r})}{\psi(\vec{r})} + V(\vec{r}) = -\frac{\hbar}{i}\frac{1}{T(t)}\frac{\partial T(t)}{\partial t} = E. \qquad \text{(Eq. 2.10)}$$

(*)Muitas vezes o processo de separação de variáveis não permite a solução da equação. O leitor pode estudar o assunto em um livro de equações diferenciais

Obtemos, portanto, duas equações independentes:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right]\psi(\vec{r}) + V(\vec{r})\,\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}), \qquad \text{(Eq. 2.11)}$$

$$\frac{\partial T(t)}{\partial t} = -\frac{Ei}{\hbar}\,T(t). \qquad \text{(Eq. 2.12)}$$

A equação original foi desmembrada em duas equações, uma que só depende das coordenadas espaciais do elétron e outra que só depende do tempo. A Eq. 2.11 é chamada de *Equação de Schroedinger independente do tempo.*

A interpretação da constante E introduzida na Eq. 2.10 é importante. No segundo termo da Eq. 2.11, a função de onda ψ aparece multiplicada pela energia potencial $V(\vec{r})$. Assim para que a equação seja dimensionamente correta E deve ser uma energia. Além disso, como E é uma constante, essa energia deve ser constante. Ora, de acordo tanto com a Mecânica clássica como com a Mecânica quântica, a energia total de um sistema é constante (Princípio da Conservação da Energia). Assim, a constante que aparece na solução da Equação de Schroedinger é interpretada como sendo a *energia total do elétron* (energia cinética mais energia potencial).

A solução da Eq. 2.12 é

$$T(t) = e^{-iEt/\hbar}. \qquad \text{(Eq. 2.13)}$$

Assim, de acordo com a Eq. 2.6, temos

$$\psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r})\, e^{-iEt/\hbar}. \qquad \text{(Eq. 2.14)}$$

E a densidade de probabilidade é dada por(*)

$$P(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}, t)\cdot\psi^*(\vec{r}, t) = \psi^*(\vec{r})\,\psi(\vec{r}). \qquad \text{(Eq. 2.15)}$$

A função $\psi(\vec{r})$ possui uma propriedade importante. Suponhamos, por exemplo, que estamos estudando o movimento de um elétron em torno de um núcleo. É evidente que em certo instante o elétron estará em algum ponto do espaço. Assim a probabilidade de encontrarmos o elétron em algum ponto do espaço deve ser unitária, de acordo com o conceito clássico de probabilidade. Nesse caso devemos impor a $\psi(\vec{r})$ a seguinte condição, conhecida como *condição de normalização*:

$$\int_{\text{todo o espaço}} \psi(\vec{r})^*\cdot\psi(\vec{r}) \quad dxdydz = 1 \qquad \text{(Eq. 2.16)}$$

Resumindo, podemos dizer que o movimento de um elétron submetido a um potencial V que só depende das coordenadas espaciais é descrito pelas seguintes equações:

$$\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right]\psi(\vec{r}) + \left[E - V(\vec{r})\right]\psi(\vec{r}) = 0; \qquad \text{(Eq. 2.17)}$$

$$T(t) = e^{-iEt/\hbar}. \qquad \text{(Eq. 2.18)}$$

$$\int_V \psi(\vec{r})^*\cdot\psi(\vec{r})\, dxdydz = 1; \qquad \text{(Eq. 2.19)}$$

$$\psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r})T(t) = \psi(\vec{r})e^{-iEt/\hbar}. \qquad \text{(Eq. 2.20)}$$

(*)Observe que os fatores $e^{-iEt/\hbar}$, que aparece em $\psi(\vec{r}, t)$, e $e^{iEt/\hbar}$, que aparece em $\psi^*(\vec{r}, t)$, se cancelam na Eq. 2.15

EXERCÍCIOS

2.1. Calcule o comprimento de onda de um elétron que foi submetido a uma diferença de potencial V.

2.2. Por que o modelo de Bohr não explica completamente os resultados experimentais?

2.3. Por que não podemos atribuir sentido físico algum a ψ? Que significado é dado a $|\psi|^2$?

2.4. Se o elétron de um átomo de hidrogênio é substituído por um méson pi negativo, temos o chamado *átomo piônico*. Supondo que a teoria de Bohr se aplica ao átomo piônico, calcule a freqüência da radiação emitida pelo méson pi ao passar do primeiro estado excitado para o estado fundamental. (A massa do méson pi é igual a 273 m_e, onde m_e é a massa do elétron).

(*)2.5. Considere uma partícula de massa m submetida a uma força F que depende apenas do deslocamento da partícula em relação a uma certa posição de equilíbrio. Um sistema desse tipo é chamado de *oscilador harmônico*. Definindo a força aplicada à partícula através da equação $F = -kx$, onde x é o deslocamento da partícula em relação à posição de equilíbrio e k é uma constante de proporcionalidade, é possível demonstrar que as funções de onda do sistema são dadas por

$$\psi_n(x) = A_n e^{-\alpha x^2/2} H_n(\sqrt{\alpha}x), \quad n = 1, 2, \ldots,$$

onde

$$\alpha^2 = \frac{mk}{\hbar^2} \text{ e } H_n \text{ é o chamado polinômio de Hermite de ordem } n.$$

Determine a constante A_n.

REFERÊNCIAS

DAVISSON, C. J. e L. H. GERMER, "Diffraction of Electrons by a Crystal of Nickel", *Phys. Rev.* **30**, 705 (1927).

de BROGLIE, L., "Recherche Sur la Theorie des Quanta", *Ann. Phys.* **3**, 22 (1925).

de BROGLIE, L., "A Tentative Theory of Light Quanta", *Phil. Mag.* **47**, 446 (1926).

SCHROEDINGER, E., *Ann. Physik*, **79**, 361, 489 (1926); **80**, 437 (1926) e **81**, 109 (1926).

BIBLIOGRAFIA

Dicke, R. H. e J. P. Wittke, *Introduction to Quantum Mechanics* (New York: Addison--Wesley, 1960).

Gamow, G., *Mr. Tompkins in Paperback* (New York: Cambridge University Press, 1965).

Schiff, L. I., *Quantum Mechanics* (New York: McGraw-Hill, 1965).

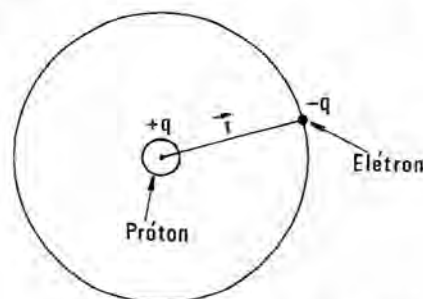
White, R. L., *Basic Quantum Mechanics* (New York: McGraw-Hill, 1966).

3 Aplicações da mecânica quântica

Agora que dispomos das ferramentas básicas da Mecânica quântica, podemos aplicá-la a dois exemplos importantes. Em primeiro lugar, estudaremos a estrutura eletrônica dos átomos, mostrando quais são os *estados possíveis* para os elétrons de um átomo. No segundo exemplo, vamos examinar as propriedades do chamado Gás de Fermi, de importantes aplicações para o estudo dos materiais semicondutores.

3.1. ESTRUTURA ELETRÔNICA DOS ÁTOMOS

Consideremos o caso do átomo de hidrogênio, representado esquematicamente na Fig. 3.1.

Figura 3.1 Representação esquemática do átomo de hidrogênio

Nosso problema é resolver a Eq. 2.3 para o sistema da Fig. 3.1. Sabemos que, para o sistema representado, o potencial é apenas função de r e é dado por

$$V(r) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{q^2}{r}. \qquad \text{(Eq. 3.1)}$$

O problema se resume portanto à solução de uma equação diferencial. Infelizmente a solução completa é bastante trabalhosa, de modo que nos limitamos a reproduzir aqui os resultados, deixando os pormenores para um livro que trate especificamente de Mecânica quântica (Sherwin, 1959).

Durante a solução do problema, aparecem três parâmetros; para que haja solução, esses parâmetros, chamados de n, l e m, devem guardar uma certa relação entre si:

$$n = 1, 2, 3, \ldots$$
$$l = 0, 1, 2, \ldots, n-1$$
$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots, \pm l.$$

O número n é o mesmo parâmetro usado empiricamente por Bohr para quantizar o momento angular. Os parâmetros l e m só podem ser calculados pela Mecânica quântica.

Aparentemente poderíamos caracterizar o *estado* de um elétron pelos três números n, l e m. Entretanto um outro fenômeno, que somente a teoria da rela-

tividade conseguiu explicar de modo satisfatório, exige um quarto número para completa caracterização do estado do elétron. Trata-se do *spin* do elétron, que pode ser imaginado como o movimento de rotação do elétron em torno de si mesmo; em outras palavras, um novo tipo de momento angular entra em jogo(*).

A Mecânica quântica relativística demonstra que o parâmetro associado ao *spin* do elétron (m_s) só pode assumir os valores $+1/2$ e $-1/2$.

Em resumo podemos dizer que quatro parâmetros, os chamados *números quânticos*, são necessários para descrever completamente o estado de um elétron: n, l, m e m_s. É possível mostrar também que a energia total E do elétron(**) é função apenas do número quântico n (também chamado de número quântico principal) e do número quântico l(***):

$$E = \text{função } (n, l). \qquad \text{(Eq. 3.2)}$$

Isso equivale dizer que quando dois elétrons têm o mesmo número quântico principal e o mesmo número quântico l, eles têm a mesma energia. Os elétrons podem entretanto estar em *estados diferentes*, bastando para isso que um dos outros números quânticos seja diferente. Na Tab. 3.1 vemos todos os estados possíveis de um elétron cujo número quântico principal é 2.

Tabela 3.1 Estados possíveis do elétron de um átomo para $n = 2$

n	l	m	m_s	
2	0	0	+1/2	Estados com a mesma energia E
2	0	0	−1/2	($n = 2, l = 0$)
2	1	−1	+1/2	
2	1	−1	−1/2	
2	1	0	+1/2	Estados com a mesma energia E
2	1	0	−1/2	($n = 2, l = 1$)
2	1	+1	+1/2	
2	1	+1	−1/2	

De acordo com a Tab. 3.1, existem 8 diferentes estados com $n = 2$. De modo geral, é possível demonstrar que o número de estados diferentes com o mesmo número quântico principal n é igual a $2n^2$. Um grupo de estados que possui o mesmo número quântico principal é chamado de *camada*. Assim, os estados disponíveis do elétron do átomo de hidrogênio podem ser dispostos em camadas. Quanto menor o número quântico associado a uma camada, menor a energia dos estados correspondentes. O estado em que a energia é mínima (no caso do hidrogênio, $n = 1$) é chamado de *estado fundamental*.

Nos átomos dos elementos mais complexos do que o hidrogênio, que possuem mais de um elétron, os estados disponíveis também podem ser dispostos em camadas, cada uma associada a um valor do número quântico principal n.

(*) Anteriormente tínhamos apenas considerado o momento angular do elétron no seu movimento *em torno do núcleo*

(**) Na ausência de um campo magnético externo

(***) Exceto no caso do hidrogênio, em que a energia só depende de n

Cada um desses estados só pode ser ocupado por um elétron, devido ao importante *princípio de exclusão de Pauli*. Esse princípio estabelece que num mesmo sistema físico *dois elétrons não podem ocupar o mesmo estado*. Em outras palavras, os quatro números quânticos não podem ser iguais para dois elétrons. Assim, por exemplo, se dois elétrons no mesmo átomo possuem os mesmos valores de n, l e m, o valor de m_s para esses elétrons não pode ser o mesmo; um tem que ter $m_s = 1/2$ e o outro $m_s = -1/2$(*).

Em qualquer átomo a ordem de ocupação dos estados é tal que a energia total do átomo, isto é, a soma das energias dos estados ocupados, é a menor possível. De modo geral, isto significa que as diferentes camadas são ocupadas sucessivamente, à medida que aumenta o número de elétrons. Em certos elementos, entretanto, como a prata, o índio, o estanho, etc., a interação entre os elétrons favorece energeticamente a ocupação de uma camada antes que a camada anterior esteja completa.

Os diferentes estados dos elétrons de um átomo são designados de vários modos. A maneira mais conveniente, naturalmente, seria especificar os quatro números quânticos. Existem, entretanto, dois sistemas de nomenclatura que datam dos primeiros dias da espectroscopia. O primeiro é usado quando estamos interessados apenas no número quântico principal. Nesse caso as camadas são designadas por letras sucessivas do alfabeto, começando pela letra K. Assim, a camada K corresponde a $n = 1$, a camada L a $n = 2$, etc. O segundo é usado para especificar os números quânticos n e l. Nesse sistema de nomenclatura, cada grupo de estados é indicado por um número e uma letra. O número é o número quântico principal. A letra indica o valor de l. Por motivos históricos, os estados correspondentes a $l = 0$ são indicados pela letra s (do inglês *sharp*); os estados em que $l = 1$ são indicados pela letra p (*principal*); os estados em que $l = 2$ são indicados pela letra d (*diffuse*). Os estados em que $l = 3$ são indicados pela letra f (*fundamental*). De $l = 4$ em diante, os estados são indicados em ordem alfabética, começando pela letra g. Assim o grupo de estados $2p$ inclui todos os estados em que $n = 2$ e $l = 1$; o grupo $5d$ compreende os estados em que $n = 5$ e $l = 2$, etc., Na Tab. 3.2 vemos os estados normalmente ocupados dos diferentes elementos.

3.1.1. Espectros dos elementos

A distribuição da Tab. 3.2 se aplica aos átomos no estado normal, não-excitado, em que a energia é mínima (estado fundamental). Quando um elétron em um certo estado recebe energia suficiente, pode passar para um estado de maior energia que se encontre desocupado. A energia necessária para causar essa *transição* pode ser fornecida por uma onda eletromagnética ou por um

(*)As partículas que têm *spin* $\pm 1/2$, $\pm 3/2$, ... são chamadas *partículas anti-simétricas* (o elétron, o próton e o nêutron estão nessa categoria). As partículas que têm *spin* 0, ± 1, ± 2, ... são chamadas *partículas simétricas* (os fótons estão incluídos nesse grupo). O Princípio de Exclusão de Pauli não se aplica apenas aos elétrons, mas a todas as partículas *anti-simétricas*. Assim, o princípio de exclusão de Pauli pode ser enunciado do seguinte modo: "Duas partículas idênticas anti-simétricas não podem ocupar o mesmo estado". É interessante ainda observar que as partículas anti-simétricas obedecem à chamada estatística de Fermi-Dirac, (Cap. 7), sendo portanto chamadas de *férmions*. As partículas simétricas obedecem à estatística de Bose-Einstein, sendo portanto chamadas de *bósons*. O elétron é, conseqüentemente, um férmion. Essa nomenclatura é muito usada nos livros de Mecânica Quântica

Tabela 3.2 Estrutura eletrônica dos elementos

Número quântico principal n			1	2		3			4	
Nomenclatura das camadas			K	L		M			N	
Número quântico l			0	0	1	0	1	2	0	1
Notação espectroscópica			$1s$	$2s$	$2p$	$3s$	$3p$	$3d$	$4s$	$4p$
Z	Elemento									
1	Hidrogênio	(H)	1							
2	Hélio	(He)	2							
3	Lítio	(Li)	2	1	—					
4	Berílio	(Be)	2	2	—					
5	Boro	(B)	2	2	1					
6	Carbono	(C)	2	2	2					
7	Nitrogênio	(N)	2	2	3					
8	Oxigênio	(O)	2	2	4					
9	Flúor	(F)	2	2	5					
10	Neônio	(Ne)	2	2	6					
11	Sódio	(Na)				1	—			
12	Magnésio	(Mg)				2	—			
13	Alumínio	(Al)				2	1			
14	Silício	(Si)		Configuração		2	2			
15	Fósforo	(P)		do neônio		2	3			
16	Enxofre	(S)				2	4			
17	Cloro	(Cl)				2	5			
18	Argônio	(A)				2	6			
19	Potássio	(K)						—	1	
20	Cálcio	(Ca)						—	2	
21	Escândio	(Sc)						1	2	
22	Titânio	(Ti)						2	2	
23	Vanádio	(V)						3	2	
24	Crômio	(Cr)						5	1	
25	Manganês	(Mn)						5	2	
26	Ferro	(Fe)						6	2	
27	Cobalto	(Co)		Configuração				7	2	
28	Níquel	(Ni)		do argônio				8	2	
29	Cobre	(Cu)						10	1	—
30	Zinco	(Zn)						10	2	—
31	Gálio	(Ga)						10	2	1
32	Germânio	(Ge)						10	2	2
33	Arsênio	(As)						10	2	3
34	Selênio	(Se)						10	2	4
35	Bromo	(Br)						10	2	5
36	Criptônio	(Kr)						10	2	6

Tabela 3.2 (*continuação*)

Número quântico principal n				4			5		6
Nomenclatura das camadas				N			O		P
Número quântico l				2	3	0	1	2	0
Notação espectroscópica				$4d$	$4f$	$5s$	$5p$	$5d$	$6s$
Z	Elemento		Configuração das camadas internas						
37	Rubídio	(Rb)		—	—	1			
38	Estrôncio	(Sr)		—	—	2			
39	Ítrio	(Y)		1	—	2			
40	Zircônio	(Zr)	Configuração	2	—	2			
41	Nióbio	(Nb)	do criptônio	4	—	1			
42	Molibdênio	(Mo)		5	—	1			
43	Tecnécio	(Tc)		6	—	1			
44	Rutênio	(Ru)		7	—	1			
45	Ródio	(Rh)		8	—	1			
46	Paládio	(Pd)		10	—	—			
47	Prata	(Ag)			—	1	—		
48	Cádmio	(Cd)			—	2	—		
49	Índio	(In)	Configuração		—	2	1		
50	Estanho	(Sn)	do paládio		—	2	2		
51	Antimônio	(Sb)			—	2	3		
52	Telúrio	(Te)			—	2	4		
53	Iodo	(I)			—	2	5		
54	Xenônio	(Xe)			—	2	6		
55	Césio	(Cs)			—			—	1
56	Bário	(Ba)			—			—	2
57	Lantânio	(La)			—			1	2
58	Cério	(Ce)			2			—	2
59	Praseodímio	(Pr)			3			—	2
60	Neodímio	(Nd)			4			—	2
61	Promécio	(Pm)			5	As camadas		—	2
62	Samário	(Sm)	As camadas $1s$		6	$5s$ a $5p$		—	2
63	Európio	(Eu)	a $4d$ contêm		7	contêm 8		—	2
64	Gadolínio	(Gd)	46 elétrons		7	elétrons		1	2
65	Térbio	(Tb)			8			1	2
66	Disprósio	(Dy)			9			1	2
67	Hólmio	(Ho)			10			1	2
68	Érbio	(Er)			11			1	2
69	Túlio	(Tm)			12			1	2
70	Itérbio	(Yb)			13			1	2
71	Lutécio	(Lu)			14			1	2

Tabela 3.2 (*continuação*)

Número quântico principal n				5			6		7
Nomenclatura das camadas				*O*			*P*		*Q*
Número quântico l				2	3	0	1	2	0
Notação espectroscópica				$5d$	$5f$	$6s$	$6p$	$6d$	$7s$
Z	Elemento		Configuração das camadas internas						
72	Háfnio	(Hf)		2	—	2			
73	Tântalo	(Ta)		3	—	2			
74	Tungstênio	(W)	As camadas	4	—	2			
75	Rênio	(Re)	$1s$ a $5p$ contêm	5	—	2			
76	Ósmio	(Os)	68 elétrons	6	—	2			
77	Irídio	(Ir)		9	—	0			
78	Platina	(Pt)		9	—	1			
79	Ouro	(Au)			—	1	—		
80	Mercúrio	(Hg)			—	2	—		
81	Tálio	(Tl)			—	2	1		
82	Chumbo	(Pb)			—	2	2		
83	Bismuto	(Bi)			—	2	3		
84	Polônio	(Po)			—	2	4		
85	Astatínio	(At)	As camadas		—	2	5		
86	Radônio	(Rn)	$1s$ a $5d$ contêm		—	2	6		
87	Frâncio	(Fr)	78 elétrons		—	2	6	—	1
88	Rádio	(Ra)			—	2	6	—	2
89	Actínio	(Ac)			—	2	6	1	2
90	Tório	(Th)			1(–)	2	6	1(2)	2
91	Protactínio	(Pa)			2(1)	2	6	1(2)	2
92	Urânio	(U)			3	2	6	1	2
93	Netúnio	(Np)			5(4)	2	6	–(1)	2
94	Plutônio	(Pu)			6(5)	2	6	–(1)	2
95	Amerício	(Am)			7	2	6	—	2
96	Cúrio	(Cm)			7	2	6	1	2
97	Berquélio	(Bk)			9	2	6	—	2
98	Califórnio	(Cf)			10	2	6	—	2
99	Einsteinio	(Es)			11	2	6	—	2
100	Férmio	(Fm)			12	2	6	—	2
101	Mendelévio	(Md)			13	2	6	—	2
102	Nobélio	(No)			14	2	6	—	2
103	Laurêncio	(Lw)			14	2	6	1	2

choque com outra partícula. Depois de um certo tempo, o átomo volta espontaneamente ao estado fundamental, emitindo o excesso de energia sob a forma de radiação eletromagnética.

Assim os átomos de um elemento, quando excitados, emitem ondas eletromagnéticas com comprimentos de onda bem característicos, que variam de elemento para elemento. O conjunto de radiações emitidas pelos átomos de um elemento é chamado de *espectro* do elemento.

3.1.2. Representação esquemática de um átomo

Vamos concluir nosso estudo da estrutura eletrônica dos átomos apresentando duas representações gráficas muito usadas na prática. A primeira dessas representações está ilustrada na Fig. 3.2 para o caso do silício, cuja estrutura eletrônica, de acordo com a Tab. 3.2, é $K^2L^8M^4$, onde os números representam o número de elétrons em cada camada. Nessa representação gráfica, as camadas são representadas por círculos e os elétrons em cada camada por pontos. O círculo central representa o núcleo. O número indicado no interior do núcleo representa a carga elétrica total do núcleo, que em um átomo no estado normal(*) é igual à soma das cargas de todos os elétrons.

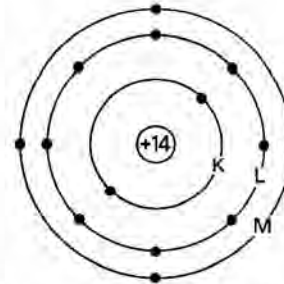
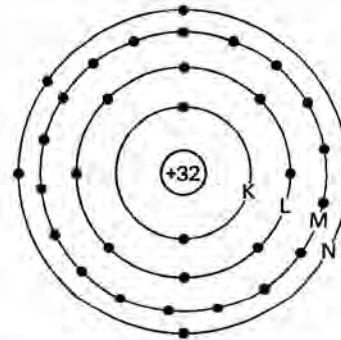
Figura 3.2 Representação esquemática de um átomo de silício

O átomo de germânio, cuja estrutura eletrônica é $K^2L^8M^{18}N^4$, é representado como na Fig. 3.3.

Figura 3.3 Representação esquemática de um átomo de germânio

Como os fenômenos que vamos estudar neste livro envolvem apenas os elétrons da camada externa (os chamados elétrons de valência), podemos usar uma representação mais simples, em que apenas os elétrons de valência são indicados. Nesse caso, associamos à parte central do átomo uma carga igual à diferença entre a carga positiva do núcleo e a carga negativa dos elétrons restantes. Como tanto o silício como o germânio possuem quatro elétrons de valência (na camada M e na camada N, respectivamente), essa representação simplificada é a mesma para os dois elementos (Fig. 3.4).

3.2. GÁS DE FERMI

Duas razões importantes justificam o estudo do Gás de Fermi neste livro. Em primeiro lugar, o Gás de Fermi é um exemplo simples e ilustrativo da apli-

(*) Não-ionizado

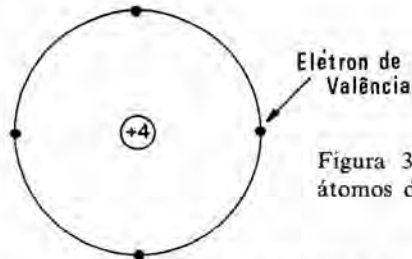



Figura 3.4 Representação esquemática simplificada dos átomos de silício e germânio

cação da Mecânica quântica a um problema prático. Em segundo lugar, usaremos uma das equações deduzidas nesta seção para o estudo do comportamento dos elétrons em um material semicondutor.

O Gás de Fermi é definido como um conjunto de partículas totalmente livres, mas sujeitas ao Princípio de Exclusão de Pauli. Em muitos metais, os elétrons de condução se comportam como se constituíssem um Gás de Fermi. Consideremos por exemplo o caso do cobre, cuja estrutura eletrônica é $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^1$ (os sobrescritos indicam o número de elétrons em cada estado). O elétron $4s$ está fracamente ligado à rede cristalina, podendo se movimentar com liberdade *quase* completa no interior do material. Quando usamos o modelo do Gás de Fermi para estudar as propriedades elétricas do cobre, estamos supondo que os elétrons $4s$ estão inteiramente livres, isto é, que sua energia potencial é nula. É claro que na prática os elétrons "livres" do cobre interagem com a rede cristalina e com outros elétrons "livres", mas essa interação é tão fraca que pode ser desprezada em primeira aproximação.

3.2.1. Gás de Fermi em uma dimensão

Vamos estudar inicialmente o comportamento do Gás de Fermi em uma dimensão. Suponhamos um elétron de massa m confinado a uma linha de comprimento L por barreiras infinitas de potencial nas extremidades da linha (Fig. 3.5).

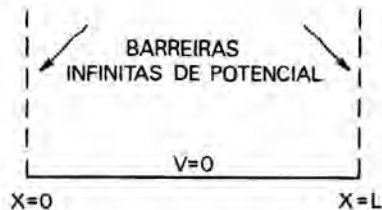



Figura 3.5 Gás de Fermi em uma dimensão

Nosso problema é resolver a Equação de Schroedinger (Eq. 2.17) para o caso em que $V = 0$ no interior da linha(*). Nesse caso, temos

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + E\psi(x) = 0. \qquad \text{(Eq. 3.3)}$$

Como a função de onda $\psi(x)$ é uma função contínua e como $\psi(x)$ deve ser zero para $x \leq 0$ e para $x \geq L$, já que o elétron não pode atravessar uma barreira infinita de potencial, a solução da Eq. 3.3 deve satisfazer às condições

(*) A condição $V = 0$ significa que o elétron está livre

de contorno:

$$\psi(0) = \psi(L) = 0. \qquad \text{(Eq. 3.4)}$$

Como estamos interessados em obter todos os *estados* disponíveis para os elétrons, vamos caracterizar cada estado por um índice n colocado em $\psi(x)$ e E, isto é, vamos escrever

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_n(x)}{dx^2} + E_n\psi_n(x) = 0; \qquad \text{(Eq. 3.5)}$$

$$\psi_n(0) = \psi_n(L) = 0. \qquad \text{(Eq. 3.6)}$$

O leitor pode facilmente resolver essa equação diferencial, obtendo

$$\psi_n = A \operatorname{sen}\frac{n\pi x}{L}; \quad n = 1, 2, 3, \ldots; \qquad \text{(Eq. 3.7)}$$

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{n\pi}{L}\right)^2. \qquad \text{(Eq. 3.8)}$$

Vamos proceder inversamente e simplesmente mostrar que

$$\psi_n = A \operatorname{sen}\frac{n\pi x}{L},$$

é uma solução da equação.

De fato,

$$\frac{d\psi_n}{dx} = \frac{n\pi A}{L}\cos\frac{n\pi x}{L},$$

$$\frac{d^2\psi_n}{dx^2} = -\frac{n^2\pi^2}{L^2} A \operatorname{sen}\frac{n\pi x}{L}.$$

Portanto

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_n(x)}{dx^2} = \frac{\hbar^2}{2m}\left[-\frac{n^2\pi^2}{L^2} A \operatorname{sen}\frac{n\pi x}{L}\right] =$$

$$= -\left[\frac{\hbar^2}{2m}\left(n\frac{\pi}{L}\right)^2\right] A \operatorname{sen}\frac{n\pi x}{L} = -E_n\psi_n(x).$$

Assim para um elétron confinado a uma linha de comprimento L, os estados disponíveis são caracterizados por uma função de onda da forma

$$\psi_n = A \operatorname{sen}\frac{n\pi x}{L}, \qquad \text{(Eq. 3.9)}$$

e por uma energia da forma

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{n\pi}{L}\right)^2. \qquad \text{(Eq. 3.10)}$$

Para calcular a constante A, usamos a condição de normalização:

$$\int_0^L |\psi_n(x)|^2\, dx = 1. \qquad \text{(Eq. 3.11)}$$

No nosso caso, temos

$$\int_0^L A^2 \operatorname{sen}^2 \frac{n\pi x}{L} dx = 1, \qquad \text{(Eq. 3.12)}$$

$$A^2 = \frac{1}{\int_0^L \operatorname{sen}^2 \frac{n\pi x}{L} dx} = \frac{1}{\frac{L}{2}} = \frac{2}{L}, \qquad \text{(Eq. 3.13)}$$

$$A = \sqrt{\frac{2}{L}}. \qquad \text{(Eq. 3.14)}$$

Em conseqüência, as expressões finais para as funções de onda e para as energias permitidas são as seguintes:

$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{L}} \operatorname{sen} \frac{n\pi x}{L} \qquad n = 1, 2, 3, \ldots; \qquad \text{(Eq. 3.15)}$$

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 \qquad n = 1, 2, 3, \ldots \qquad \text{(Eq. 3.16)}$$

De acordo com a Eq. 3.16, a energia de um elétron confinado à linha não pode variar continuamente; os únicos valores permitidos para a energia do elétron são da forma

$$E_n = n^2 \Delta, \qquad \text{(Eq. 3.17)}$$

onde:

$$\Delta = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{L}\right)^2.$$

Suponhamos agora que estamos interessados em acomodar N elétrons na linha. De acordo com o Princípio de Exclusão de Pauli, o mesmo estado não pode ser ocupado por mais de um elétron. Para cada valor de n na Eq. 3.15, existem dois valores possíveis para o *spin* do elétron, $+1/2$ e $-1/2$, e portanto dois estados disponíveis. À temperatura do zero absoluto (0 K), o sistema se encontra no estado fundamental (estado de mínima energia) e portanto os estados disponíveis são preenchidos em ordem crescente de energia. Assim, por exemplo, se existem 13 elétrons na linha, a distribuição desses elétrons entre os diferentes estados a 0 K será a seguinte:

$n = 1$ 2 elétrons,
$n = 2$ 2 elétrons,
$n = 3$ 2 elétrons,
$n = 4$ 2 elétrons,
$n = 5$ 2 elétrons,
$n = 6$ 2 elétrons,
$n = 7$ 1 elétron, (*nível incompleto*),
$n > 7$ 0 elétrons, (*níveis vazios*).

A energia mais elevada para a qual ainda existem estados ocupados a 0 K (E_7, no exemplo anterior) é chamada de *energia de Fermi*.

Repare que como a energia é uma função quadrática do número quântico n (Eq. 3.17), o número de estados disponíveis dentro de uma dada faixa de energias ΔE diminui à medida que n aumenta (e portanto à medida que E aumenta). Para analisarmos quantitativamente a variação do número de estados com a energia, definimos a chamada *densidade de estados* $D(E)$ como o número de estados disponíveis por unidade de energia.

Vamos agora calcular a densidade de estados do Gás de Fermi em uma dimensão. Nosso ponto de partida pode ser a Eq. 3.16. Considerando a energia E_n como uma função contínua de n(*), podemos diferenciar a Eq. 3.16, obtendo

$$dE_n = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{L}\right)^2 2n\,dn, \qquad \text{(Eq. 3.18)}$$

$$\frac{dn}{dE_n} = m\left(\frac{L}{\pi\hbar}\right)^2 \frac{1}{n}. \qquad \text{(Eq. 3.19)}$$

Como existem dois estados disponíveis para cada valor de n, a densidade de estados é dada por

$$D(E) = 2\frac{dn}{dE_n} = 2m\left(\frac{L}{\pi\hbar}\right)^2 \cdot \frac{1}{n} = \frac{4L}{2\pi\hbar}\left(\frac{m}{2E}\right)^{1/2} \qquad \text{(Eq. 3.20)}$$

ou, finalmente,

$$D(E) = \frac{L}{\pi\hbar}\sqrt{2m}\,E^{-1/2}. \qquad \text{(Eq. 3.21)}$$

A Fig. 3.6 é um gráfico da variação da densidade de estados $D(E)$ com a energia para o Gás de Fermi em uma dimensão. À temperatura de 0 K, todos os estados com energias entre 0 e E_F (energia de Fermi) estão ocupados e todos os estados com energias maiores que E_F estão vazios.

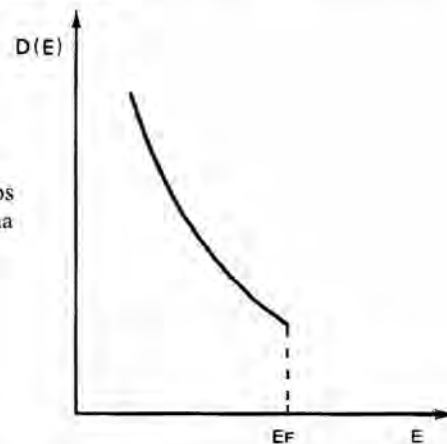



Figura 3.6 Variação da densidade de estados com a energia para o Gás de Fermi em uma dimensão

(*) Embora não seja estritamente válida, já que, como vimos, o número n só pode assumir valores inteiros, essa aproximação é usada em muitos problemas de Mecânica quântica e em geral conduz a resultados corretos

3.2.2. Gás de Fermi em três dimensões

Embora matematicamente mais complexo, o problema do Gás de Fermi em três dimensões não passa de uma extensão do problema unidimensional. Suponhamos, por exemplo, que os elétrons estão confinados a um cubo de aresta a (Fig. 3.7).

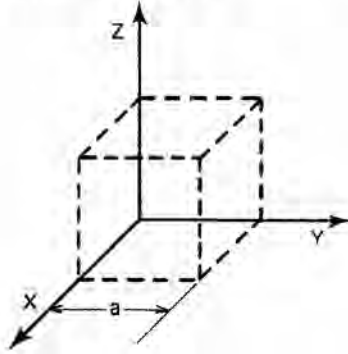



Figura 3.7 Gás de Fermi em três dimensões

Nosso problema é resolver a equação de Schroedinger em três dimensões

$$\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right]\psi(x, y, z) + E\psi(x, y, z) = 0, \qquad \text{(Eq. 3.22)}$$

sujeita às seguintes condições de contorno:

$$\begin{aligned} \psi(0, y, z) &= \psi(a, y, z) = 0; \\ \psi(x, 0, z) &= \psi(x, a, z) = 0; \\ \psi(x, y, 0) &= \psi(x, y, a) = 0. \end{aligned} \qquad \text{(Eq. 3.23)}$$

As Eqs. 3.23 são uma conseqüência do fato de que a função de onda deve se anular nas faces do cubo.

Por analogia com a solução unidimensional, Eqs. 3.7 e 3.8, a solução da Eq. 3.22 é dada por

$$\psi(x, y, z) = A \operatorname{sen}\frac{n_x \pi x}{a} \operatorname{sen}\frac{n_y \pi y}{a} \operatorname{sen}\frac{n_z \pi z}{a}; \qquad \text{(Eq. 3.24)}$$

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}[n_x^2 + n_y^2 + n_z^2], \qquad \text{(Eq. 3.25)}$$

onde

$$n_x, n_y, n_z = 1, 2, 3, \ldots$$

Fica a cargo do leitor verificar que as funções de onda (Eq. 3.24) satisfazem à equação de Schroedinger (Eq. 3.22).

Para calcularmos a constante A usamos a condição de normalização seguinte:

$$\int_0^a \int_0^a \int_0^a |\psi(x, y, z)|^2 \, dx dy dz = 1. \qquad \text{(Eq. 3.26)}$$

Substituindo a Eq. 3.24 na Eq. 3.26, temos

$$A^2 \int_0^a \operatorname{sen}^2 \frac{n_x \pi x}{a} dx \int_0^a \operatorname{sen}^2 \frac{n_y \pi y}{a} dy \int_0^a \operatorname{sen}^2 \frac{n_z \pi z}{a} dz = 1. \qquad \text{(Eq. 3.27)}$$

Como cada uma das integrais é igual a $a/2$, temos

$$A = \sqrt{\frac{8}{a^3}}, \qquad \text{(Eq. 3.28)}$$

e conseqüentemente

$$\psi_n(x, y, z) = \sqrt{\frac{8}{a^2}} \operatorname{sen} \frac{n_x \pi x}{a} \operatorname{sen} \frac{n_y \pi y}{a} \operatorname{sen} \frac{n_z \pi z}{a}. \qquad \text{(Eq. 3.29)}$$

Assim o estado de um elétron confinado a uma região tridimensional é caracterizado por quatro números quânticos: três números quânticos espaciais, n_x, n_y, n_z, que podem assumir os valores $1, 2, 3, \ldots$ e um número quântico de *spin*, m_s, que pode assumir os valores $+1/2$ e $-1/2$.

Vamos agora calcular a densidade de estados do Gás de Fermi em três dimensões.

Nosso ponto de partida será a equação que nos dá as energias permitidas para o elétron:

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\pi^2}{a^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2). \qquad \text{(Eq. 3.30)}$$

Se representarmos os valores de n_x, n_y e n_z em um sistema de eixos cartesianos, o lugar geométrico dos pontos de mesma energia E será dado por

$$n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 = \frac{2ma^2}{\hbar^2 \pi^2} E = \left[\frac{\sqrt{2m}\, a}{\hbar \pi} E^{1/2} \right]^2. \qquad \text{(Eq. 3.31)}$$

o que corresponde à superfície de uma esfera de raio

$$R = \frac{\sqrt{2m}\, a}{\hbar \pi} E^{1/2}, \qquad \text{(Eq. 3.32)}$$

conforme vemos na Fig. 3.8.

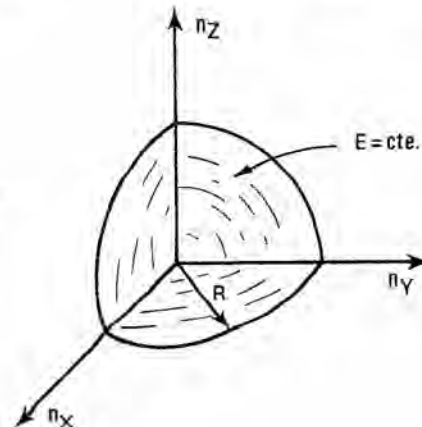



Figura 3.8 Superfície de energia constante de um Gás de Fermi em três dimensões

Como os números quânticos n_x, n_y e n_z são positivos por definição, todos os estados de energia menor que E estão compreendidos em um volume igual a 1/8 do volume de uma esfera de centro na origem e raio R. Nesse caso, o número de estados com energia menor que E é dado por

$$n_{<E} = 2\frac{1}{8}\cdot\frac{4}{3}\pi R^3 = \frac{a^3}{3\pi^2}\left[\frac{2m}{\hbar^2}\right]^{3/2} E^{3/2}, \qquad \text{(Eq. 3.33)}$$

onde o fator 2 se deve à existência de duas orientações possíveis para o *spin* do elétron.

Procedendo como para o caso unidimensional, diferenciamos a Eq. 3.33, obtendo

$$D(E) = \frac{dn}{dE} = \frac{a^3}{2\pi^2}\left[\frac{2m}{\hbar^2}\right]^{3/2} E^{1/2}. \qquad \text{(Eq. 3.34)}$$

A Eq. 3.34 nos dá a densidade de estados de um Gás de Fermi em três dimensões. Podemos definir também a *densidade de estados por unidade de volume* como sendo a relação entre a densidade de estados e o volume no qual os elétrons estão confinados. Como supusemos que os elétrons estavam confinados a um cubo de lado a (volume a^3), a densidade de estados por unidade de volume do Gás de Fermi em três dimensões é dada por

$$D_v(E) = \frac{1}{V} D(E) = \frac{1}{2\pi^2}\left[\frac{2m}{\hbar^2}\right]^{3/2} E^{1/2}. \qquad \text{(Eq. 3.35)}$$

Como veremos no Cap. 8, a Eq. 3.35, embora deduzida para o Gás de Fermi, pode ser reinterpretada de modo a representar a densidade de estados por unidade de volume dos elétrons de condução de um semicondutor.

EXERCÍCIOS

3.1. Faça uma lista dos estados possíveis de um elétron de um átomo cujo número quântico principal é 3.

3.2. Mostre que a energia de Fermi do Gás de Fermi em uma dimensão é dada por

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{N\pi}{2L}\right)^2,$$

onde N é o número total de elétrons.

3.3. Neste capítulo, para obtermos as densidades de estados nos casos unidimensional e tridimensional, consideramos a energia como uma função de n. Analise cuidadosamente a validade dessa aproximação.

3.4. Estude o comportamento de um Gás de Fermi confinado a uma semi-esfera de centro na origem dos eixos cartesianos, raio R e face plana apoiada no plano $xy\,(z \geq 0)$.

REFERÊNCIAS

SHERWIN, C. W., *Introduction to Quantum Mechanics* (New York: Holt, Rinehart and Winston, 1966), Cap. 4.

BIBLIOGRAFIA

Kittel, C., *Introduction to Solid State Physics* (New York: John Wiley, 1967), Cap. 7.

4 Noções de cristalografia

4.1. SUBSTÂNCIAS CRISTALINAS

Chamamos de substância cristalina qualquer substância cujos átomos estão dispostos regularmente no espaço (Fig. 4.1).

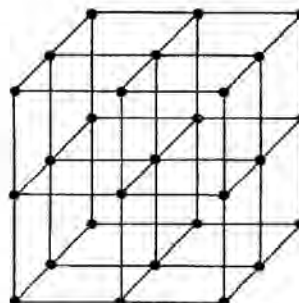



Figura 4.1 Estrutura de uma substância cristalina

Um modo interessante de caracterizar um cristal como o da Fig. 4.1 é definir uma estrutura puramente geométrica, a cujos pontos são associados um ou mais átomos para reproduzir o cristal. Esse método de representar as substâncias cristalinas está ilustrado na Fig. 4.2.

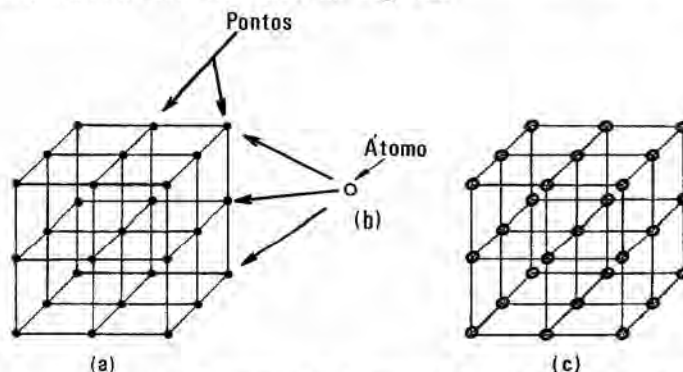



Figura 4.2 A estrutura cristalina que aparece em (c) é formada associando-se um átomo (b) a cada ponto de uma estrutura puramente geométrica (a)

A estrutura puramente geométrica é chamada de *rede cristalina* da substância considerada(*). O conjunto de átomos que é associado a cada ponto da rede cristalina (no caso da Fig. 4.2, apenas um átomo) é chamado de *base*. Qualquer cristal pode ser definido através de uma rede cristalina associada a uma base apropriada.

A Fig. 4.3 mostra a rede cristalina e a base correspondente para o caso do cloreto de sódio (NaCl). Repare que neste exemplo a base é constituída por dois átomos diferentes, Na e Cl.

(*)*Crystal lattice*, em inglês

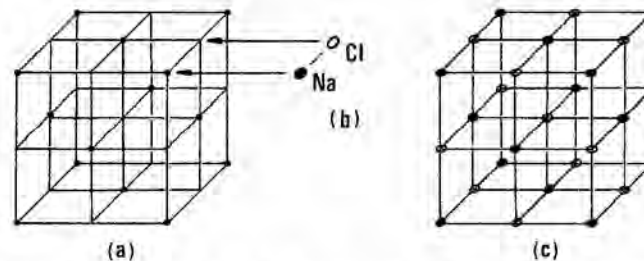



Figura 4.3 Cristal de cloreto de sódio. (a) rede cristalina; (b) base; (c) cristal completo

É importante observar que o mesmo cristal pode ser representado por mais de uma rede cristalina. Nesse caso, naturalmente, as bases associadas a cada rede serão diferentes.

4.2. CÉLULA UNITÁRIA E SISTEMAS CRISTALINOS

Um fato importante a respeito das redes cristalinas é que qualquer rede cristalina tridimensional pode ser gerada pela translação de um paralelepípedo ao longo de três eixos mutuamente perpendiculares. Assim, por exemplo, a rede cristalina da Fig. 4.2 pode ser gerada pela translação de um cubo (Fig. 4.4).

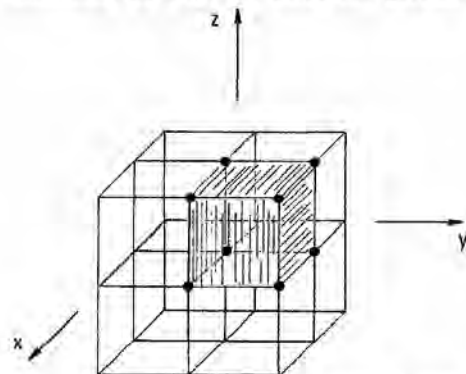



Figura 4.4 Geração de uma rede cristalina pela translação de um cubo

O paralelepípedo que gera a rede cristalina é chamado de *célula unitária* da rede. A mesma rede cristalina pode ser gerada por paralelepípedos de diferentes tamanhos. O menor paralelepípedo capaz de gerar a rede cristalina é chamado de *célula primitiva* da rede.

De acordo com as relações entre os lados e os ângulos da célula unitária, as redes cristalinas podem ser divididas em sete *sistemas cristalinos*. Cada um desses sistemas por sua vez compreende um ou mais *tipos* de rede cristalina, de acordo com as simetrias apresentadas pela rede. Existem ao todo 14 tipos possíveis de rede cristalina tridimensional.

As Figs. 4.5 a 4.11 mostram as células unitárias (que não são necessariamente células primitivas) dos 14 tipos de redes cristalinas.

Convém lembrar que, como a rede cristalina, a célula unitária é uma estrutura puramente geométrica, a cujos pontos deve ser associada uma *base* adequada para gerar o cristal. É evidente que podemos definir qualquer cristal por

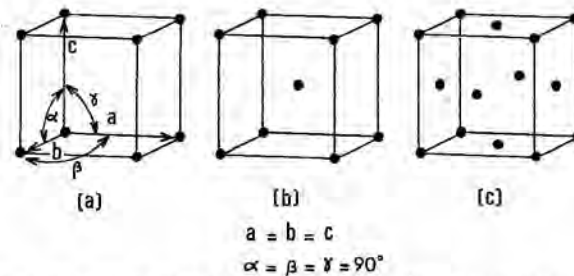



Figura 4.5 Sistema cúbico; (a) cúbico simples; (b) cúbico de corpo centrado; (c) cúbico de faces centradas

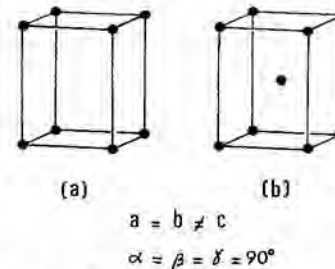



Figura 4.6 Sistema tetragonal; (a) tetragonal simples; (b) tetragonal de corpo centrado

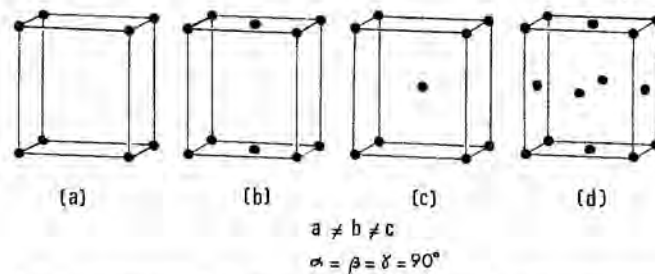



Figura 4.7 Sistema ortorrômbico; (a) ortorrômbico simples; (b) ortorrômbico de bases centradas; (c) ortorrômbico de corpo centrado; (d) ortorrômbico de faces centradas

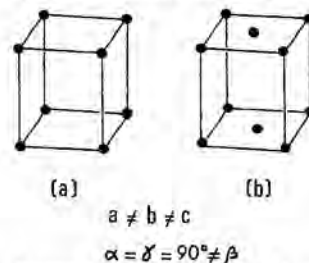



Figura 4.8 Sistema monoclínico; (a) monoclínico simples; (b) monoclínico de bases centradas

Figura 4.9 Sistema triclínico

uma célula unitária com os átomos devidamente posicionados, já que uma estrutura desse tipo é capaz de gerar todo o cristal por translação. Por que, então, nos darmos ao trabalho de definir separadamente uma rede cristalina e uma base? A razão é que em um tratamento matemático mais profundo dos cristais, a definição do cristal pela rede e pela base torna as equações mais simples.

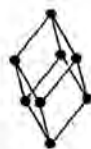



Figura 4.10 Sistema trigonal

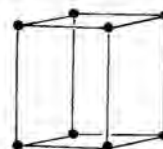



Figura 4.11 Sistema hexagonal

Por outro lado, como estamos interessados apenas nas aplicações da cristalografia ao estudo das propriedades dos materiais semicondutores, vamos nos ater à representação das células unitárias já com os átomos posicionados, o que permite uma visualização mais simples da estrutura cristalina. A Fig. 4.12 ilustra o que acabamos de explicar.

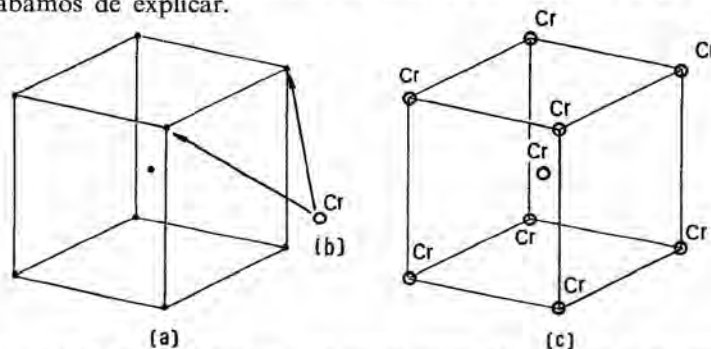



Figura 4.12 (a) Célula unitária cúbica de corpo centrado; (b) base a ser associada à rede cristalina; no caso, átomo de cromo; (c) célula unitária do cromo com os átomos posicionados

A partir deste momento vamos apresentar as estruturas dos cristais na forma da Fig. 4.12(c), deixando a cargo do leitor a identificação da rede cristalina e da base correspondente. Outros elementos que possuem a mesma estrutura cristalina que o cromo (cúbica de corpo centrado) são o lítio, o bário, o nióbio, o césio e o tungstênio.

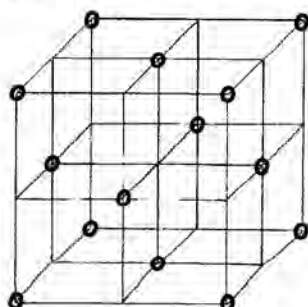



Figura 4.13 Estrutura cristalina do alumínio

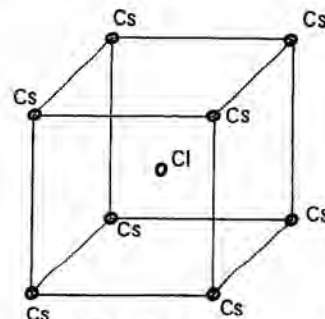



Figura 4.14 Estrutura cristalina do cloreto de césio

A Fig. 4.13 mostra a estrutura cristalina do aluminio (cúbica de faces centradas). Outros elementos com a mesma estrutura são o cobre, o ouro, o chumbo, o níquel e a prata.

A Fig. 4.14 mostra um exemplo de cristal composto, o cloreto de césio. A rede cristalina do cloreto de césio é cúbica simples; a base consiste em dois átomos, um de cloro e um de césio.

Finalmente apresentamos na Fig. 4.15 a célula unitária do diamante, que nada mais é que o carbono na forma cristalina(*).

Aproveitamos esse exemplo para introduzir o parâmetro *a*, a chamada *constante da rede*; como vemos na Fig. 4.15, a constante de rede é igual ao lado da célula unitária.

É interessante observar que a estrutura da Fig. 4.15 é exatamente a mesma do germânio e do silício, duas substâncias de vital importância para a tecnologia dos dispositivos semicondutores; apenas a constante da rede é diferente.

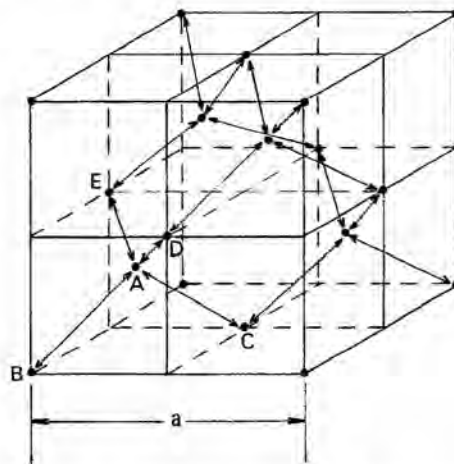



Figura 4.15 Estrutura cristalina do diamante

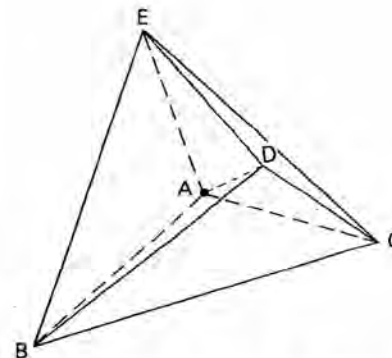



Figura 4.16 Ligações tetraédricas

A Fig. 4.16 mostra a parte inferior esquerda da Fig. 4.15, onde estão localizados os átomos A, B, C, D e E.

Os átomos B, C, D e E formam um tetraedro regular, com o átomo A exatamente no centro. Assim, o átomo A está à mesma distância dos quatro átomos mais próximos, B, C, D e E. Como veremos mais tarde, entre o átomo A e os átomos B, C, D e E existe uma ligação especial, chamada *ligação covalente*, que mantém os átomos firmemente presos à rede cristalina. Essa ligação, que no caso de cristais como o diamante, o germânio e o silício é também chamada de *ligação tetraédrica* (porque os átomos vizinhos de qualquer átomo considerado formam um tetraedro) tem uma profunda influência sobre as propriedades dos materiais semicondutores.

(*)Chamamos a atenção do leitor para a diferença extraordinária entre o carbono na sua forma cristalina (diamante) e amorfa (grafita)

4.3. CÁLCULO DE NÚMERO DE ÁTOMOS DE UM CRISTAL POR UNIDADE DE VOLUME

Conhecida a célula unitária de um cristal e a constante de rede, o número de átomos do cristal por unidade de volume pode ser calculado facilmente. Consideremos, por exemplo, uma substância cristalina cúbica de corpo centrado (Fig. 4.17).

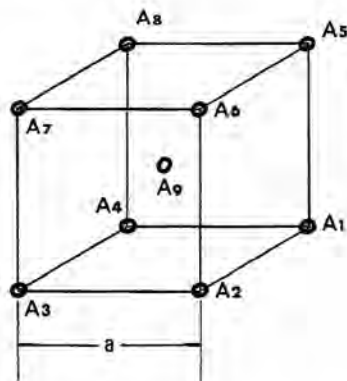



Figura 4.17 Exemplo do cálculo do número de átomos por unidade de volume em um cristal

Como vimos, a célula unitária deve ser transladada ao longo de três dimensões mutuamente perpendiculares para gerar o cristal no espaço. Assim um átomo como A_1, localizado no vértice do cubo, pertence simultaneamente a 8 células adjacentes. Para efeito de cálculo, apenas 1/8 desse átomo pertence à célula unitária da Fig. 4.17. Como existem 8 vértices, a contribuição dos átomos dos vértices para uma célula unitária é igual a $8 \times 1/8 = 1$ átomo.

Por outro lado, o átomo A_9, localizado no centro do cubo, pertence exclusivamente à célula da ilustração. Assim, o número total de átomos pertencentes à célula é dado por: $N = 1$ (contribuição dos átomos dos vértices) $+1$ (contribuição do átomo central) $= 2$ átomos.

Como o volume da célula é a^3, onde a é a constante de rede, o número de átomos por unidade de volume de um cristal como o da Fig. 4.17 é igual a $2/a^3$.

Vamos agora calcular o número de átomos por unidade de volume para os materiais que nos interessam mais de perto, o germânio e o silício, cuja estrutura cristalina é a representada na Fig. 4.15.

No caso da estrutura da Fig. 4.15, cada átomo situado no vértice do cubo pertence simultaneamente a 8 células, exatamente como o exemplo anterior. Assim a contribuição total dos átomos dos vértices é igual a 1 átomo.

Os átomos situados nos centros das faces do cubo pertencem a duas células vizinhas; como existem 6 faces, a contribuição total para uma célula é igual a $6 \times 1/2 = 3$ átomos.

Os 4 átomos situados no interior da célula pertencem exclusivamente à célula considerada.

Podemos sumarizar o nosso cálculo como segue.

Número de átomos nos vértices da célula = 8	Contribuição de cada átomo dos vértices para a célula = 1/8	Contribuição total para a célula: 8 × 1/8 = 1
Número de átomos nos centros das faces da célula = 6	Contribuição de cada átomo dos centros das faces para a célula = 1/2	6 × 1/2 = 3
Número de átomos no interior da célula = 4	Contribuição de cada átomo interior para a célula = 1/1	4 × 1/1 = 4
		Número total de átomos da célula 8

Como o volume da célula é a^3, o número por unidade de volume será

$$\text{número de átomos/unidade de volume} = 8/a^3$$

Os valores numéricos correspondentes são os seguintes:

Substâncias	*Constante de rede* (nm)*	*Número de átomos*/cm^3
diamante	0,356	$1{,}77 \times 10^{23}$
germânio	0,566	$4{,}42 \times 10^{22}$
silício	0,543	$5{,}00 \times 10^{22}$

Esse processo para o cálculo do número de átomos por unidade de volume de um cristal utilizando-se a célula unitária e calculando-se a contribuição de cada átomo para a célula pode ser aplicado a qualquer cristal.

4.4. POSIÇÃO E ORIENTAÇÃO DOS PLANOS DE UM CRISTAL

Os átomos de um cristal definem uma série de planos. A Fig. 4.18, por exemplo, mostra três dos planos definidos pelos átomos de um cristal cúbico de faces centradas.

O conhecimento da posição e orientação desses planos em uma dada amostra pode ser extremamente importante. Muitos cristais, por exemplo, possuem os chamados "planos de clivagem", que apresentam a seguinte propriedade: quando golpeamos a amostra na direção de um plano de clivagem, a fratura ocorre exatamente nesse plano. Quando a direção do golpe não coincide com nenhum dos planos de clivagem, a fratura é irregular e a amostra pode ser estilhaçada. A lapidação das pedras preciosas é feita utilizando-se esse princípio.

A maneira mais imediata de definir um plano de um cristal seria indicar as coordenadas dos traços desse plano nos três eixos de referência. Assim, por exemplo, o plano P da Fig. 4.19 seria definido pelos pontos: $A(a, 0, 0)$, $B(0, a, 0)$ e $C(0, 0, a)$, onde a é a constante de rede.

Em cristalografia, entretanto, prefere-se definir os planos através dos chamados *índices de Miller*, obtidos pelo seguinte processo (Fig. 4.20):

(*) 1 nm (1 nanometro) = 10^{-9} m

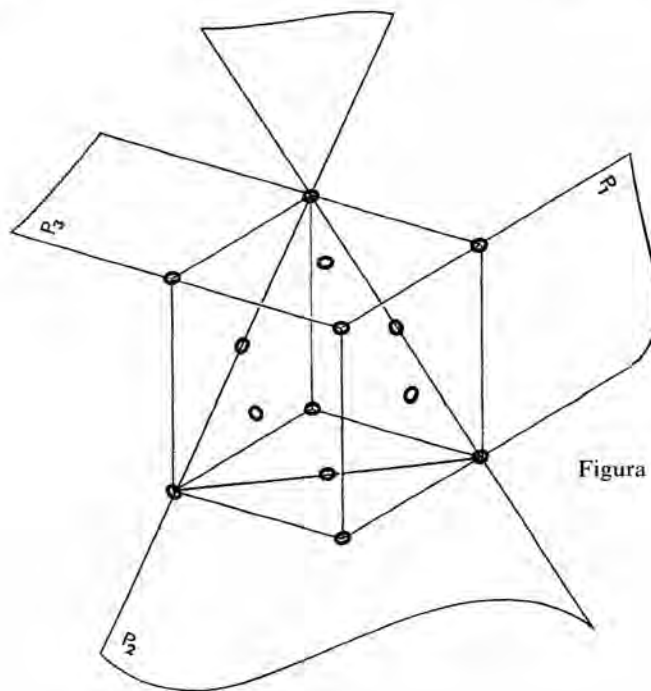



Figura 4.18 Planos de um cristal

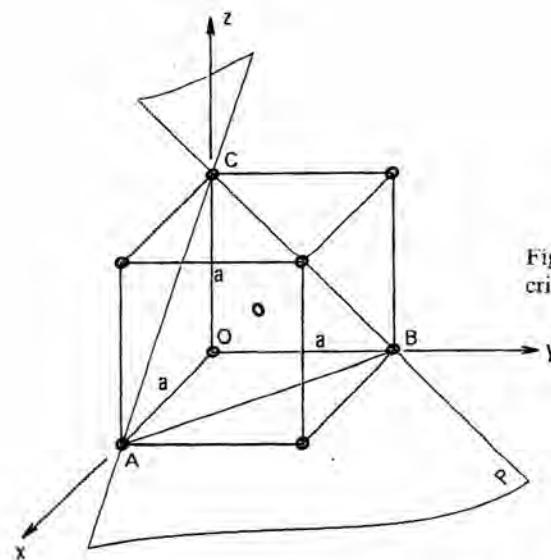
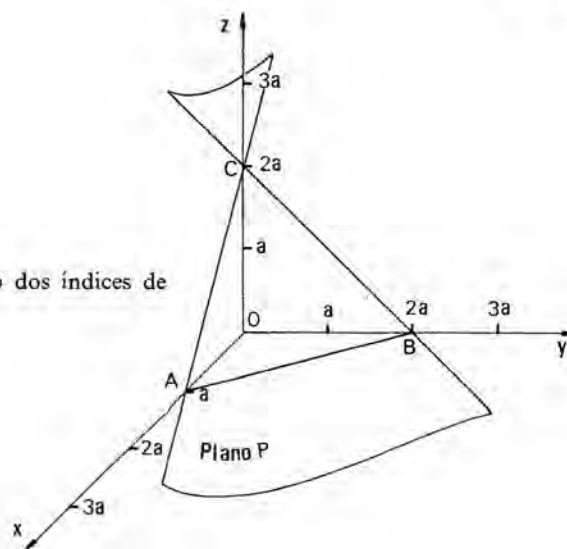



Figura 4.19 Definição de um plano cristalino por seus traços

a) Calculam-se as distâncias da origem aos pontos A, B e C de interseção do plano com os eixos de referência, tomando como unidade a constante de rede. No caso da Fig. 4.20,

$$\overline{OA} = 1, \qquad \overline{OB} = 2, \qquad \overline{OC} = 2.$$

Figura 4.20 Exemplo de cálculo dos índices de Miller

b) Tomam-se os recíprocos dos valores encontrados:

$$1/\overline{OA} = 1, \quad 1/\overline{OB} = 1/2, \quad 1/\overline{OC} = 1/2.$$

c) Reduz-se os resultados a números inteiros que guardem entre si a mesma relação que os valores do ítem (b).

No caso da Fig. 4.20, multiplicamos todos os números por 2, obtendo:

$$2 \times 1 = 2, \quad 2 \times 1/2 = 1, \quad 2 \times 1/2 = 1.$$

Os números obtidos são chamados de índices de Miller e representados entre parênteses: (2 1 1). É evidente que os índices de Miller não definem apenas um plano, mas toda uma família de planos paralelos.

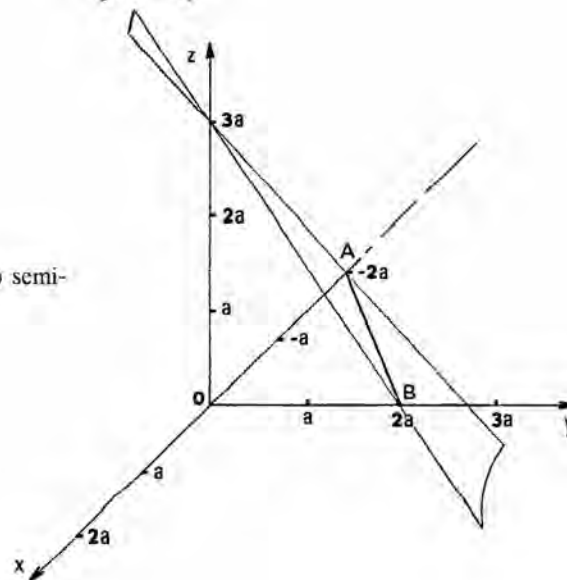



Figura 4.21 Plano com traço no semi-eixo negativo

Quando o plano intercepta um dos eixos no semi-eixo negativo, atribuímos um sinal negativo à coordenada correspondente. A Fig. 4.21 ilustra esse caso. O cálculo seria o seguinte:

$\overline{OA} = -2,\quad \overline{OB} = 2,\quad \overline{OC} = 3;$
$1/\overline{OA} = -1/2\quad 1/\overline{OB} = 1/2,\quad 1/\overline{OC} = 1/3;$
$6 \times (-1/2) = -3,\quad 6 \times 1/2 = 3,\quad 6 \times 1/3 = 2.$
Índices de Miller: $(\bar{3}\ 3\ 2)$.

Repare que o sinal negativo é colocado sobre o número.

A Fig. 4.22 mostra alguns planos de um cristal cúbico simples e os índices de Miller associados a esses planos. Repare que quando um dos índices de Miller é zero, isto significa que o plano é paralelo ao eixo correspondente.

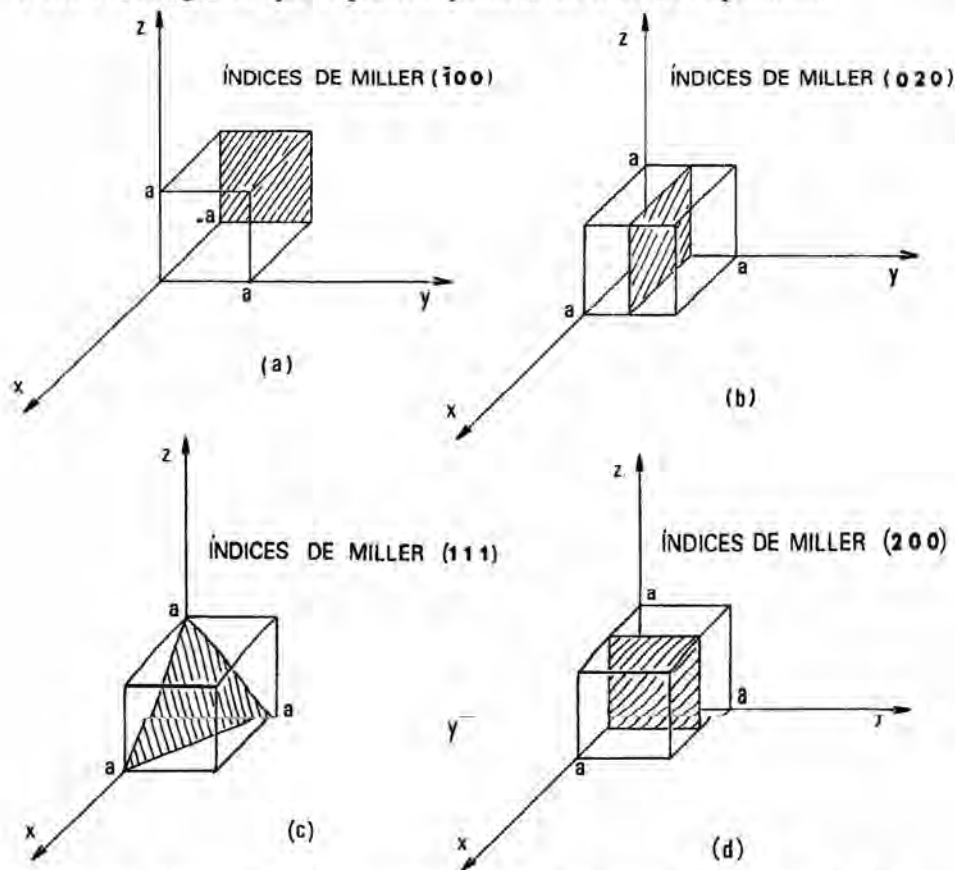



Figura 4.22 Alguns planos de um cristal cúbico: (a) plano $(\bar{1}\ 0\ 0)$, (b) plano (0 2 0), (c) plano (1 1 1), (d) plano (2 0 0)

É fácil demonstrar que os índices de Miller de um plano são proporcionais aos co-senos diretores da perpendicular traçada da origem ao plano considerado; na Fig. 4.23 estão indicados os parâmetros envolvidos.

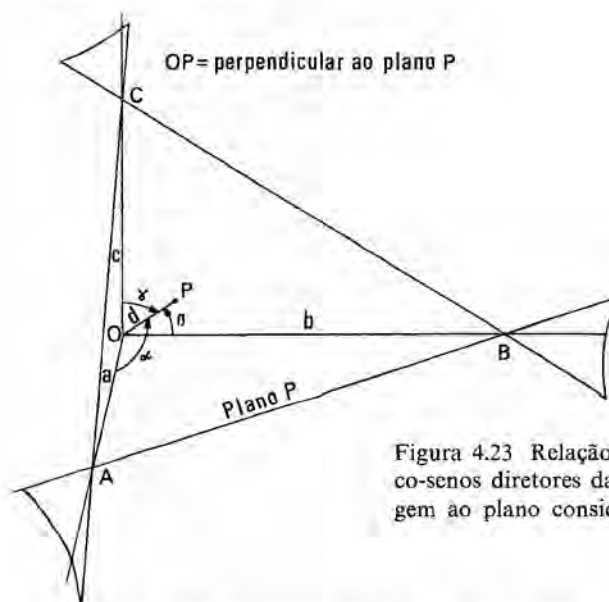



Figura 4.23 Relação entre os índices de Miller e os co-senos diretores da perpendicular baixada da origem ao plano considerado

Os co-senos diretores da reta definida por OP são dados por

$$\cos \alpha = d/a, \quad \cos \beta = d/b, \quad \cos \gamma = d/c,$$

onde d é a distância da origem ao plano considerado.

Assim os co-senos diretores são proporcionais a $1/a$, $1/b$, $1/c$, do mesmo modo que os índices de Miller.

4.5. DIREÇÕES EM UM CRISTAL

Convencionalmente, os índices que caracterizam uma direção em um cristal são definidos pelos três menores números inteiros que guardam entre si a mesma relação que as componentes de um vetor de módulo arbitrário, paralelo à direção considerada.

A Fig. 4.24 mostra um exemplo. A direção dada é a direção d. Um vetor $\vec{v}$, traçado paralelamente a d, possui as seguintes componentes:

$$v_1 = 1, \quad v_2 = 1, \quad v_3 = 7/2.$$

Multiplicando por 2 as componentes de v, obtemos

$$2 \times 1 = 2, \quad 2 \times 1 = 2, \quad 2 \times 7/2 = 7.$$

Direção d: $[2\,2\,7]$.

Repare que os índices que definem a direção são colocados entre colchetes.

Pode-se demonstrar (Prob. 4.5) que em um cristal cúbico o plano $(h\,k\,l)$ é perpendicular à direção $[h\,k\,l]$. Os exemplos da Fig. 4.25 ilustram esse fato.

4.6. IMPORTÂNCIA DOS ÍNDICES DE MILLER

Provavelmente o leitor ainda não está convencido da utilidade dos índices de Miller. Por que indicar um plano cristalino pelos índices de Miller, quando

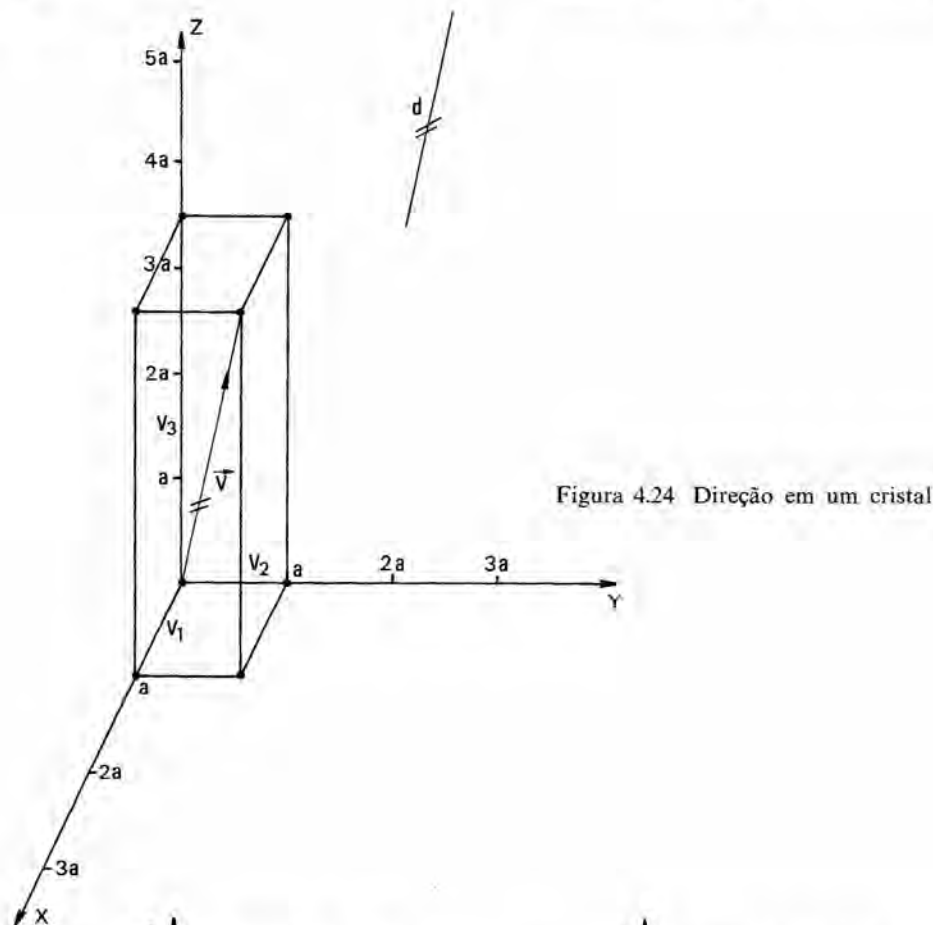



Figura 4.24 Direção em um cristal

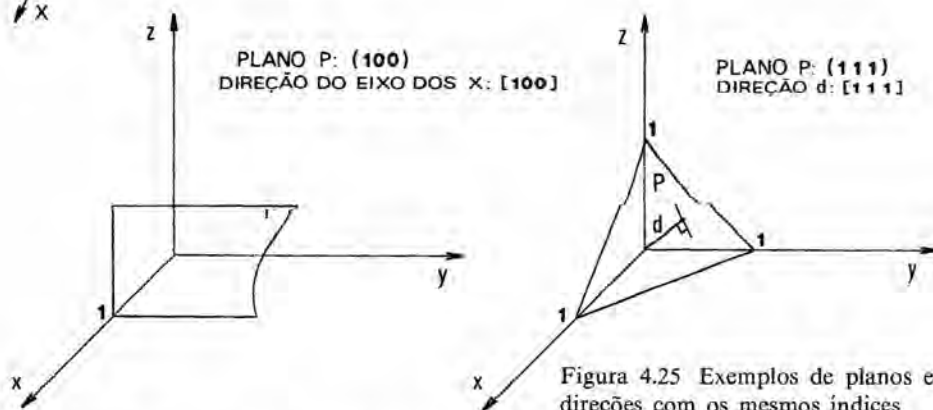



Figura 4.25 Exemplos de planos e direções com os mesmos índices

seria muito mais simples defini-lo pelas coordenadas dos seus traços? Na verdade, a importância dos índices de Miller está intimamente relacionada ao conceito de rede recíproca, que infelizmente foge ao escopo deste livro. Mesmo assim, fizemos questão de definir os índices de Miller para que o leitor possa

compreender como são indicados os planos de um cristal nos artigos científicos. Por exemplo, se o leitor encontrar a expressão "um cristal de germânio, com o plano (1 0 0) paralelo à direção do campo magnético aplicado...", saberá imediatamente que o campo magnético é paralelo a uma das faces do cubo da célula unitária do cristal de germânio.

4.7. DETERMINAÇÃO DA ESTRUTURA DE UM CRISTAL

A tecnologia atual ainda não permite, exceto em raros casos, a observação direta da estrutura de um cristal. Como é possível, então, determinar a posição dos átomos no interior do cristal, isto é, as dimensões e a composição da célula unitária?

A solução para esse problema consiste em fazer incidir um feixe de radiação (fótons, nêutrons, elétrons) sobre o cristal. Quando o comprimento de onda da radiação é da mesma ordem de grandeza que a constante de rede do cristal, o feixe é difratado pelos átomos do cristal. A análise do feixe difratado permite calcular matematicamente as posições dos átomos do cristal.

Vejamos agora como a análise do feixe difratado nos permite determinar a estrutura de um cristal.

Vamos supor que façamos incidir um feixe de raios X em uma amostra cristalina (Fig. 4.26).

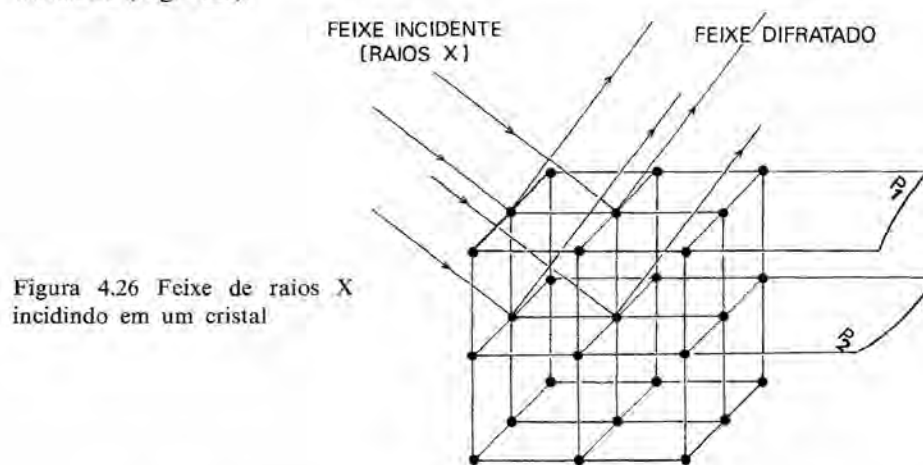



Figura 4.26 Feixe de raios X incidindo em um cristal

A Fig. 4.27 é uma vista de perfil do cristal da Fig. 4.26, que mostra como os raios X são difratados pelo conjunto de planos paralelos P_1, P_2, ... do cristal.

Como vemos na Fig. 4.27, os raios são refletidos pelos átomos localizados nos planos P_1, P_2... e em seguida são registrados em uma placa fotográfica. Chamando de d a distância entre os planos e de θ o ângulo entre o feixe incidente e o conjunto de planos paralelos, a distância entre os pontos de incidência no filme de dois raios refletidos por planos vizinhos, como P_1 e P_2, é igual a ($d \cos \theta$). Ora, como a é extremamente pequeno, o ponto de incidência no filme dos raios refletidos R_1, R_2, R_3, ... é praticamente o mesmo. Em conseqüência a imagem produzida no filme pelos raios R_1, R_2, R_3, etc. será um ponto.

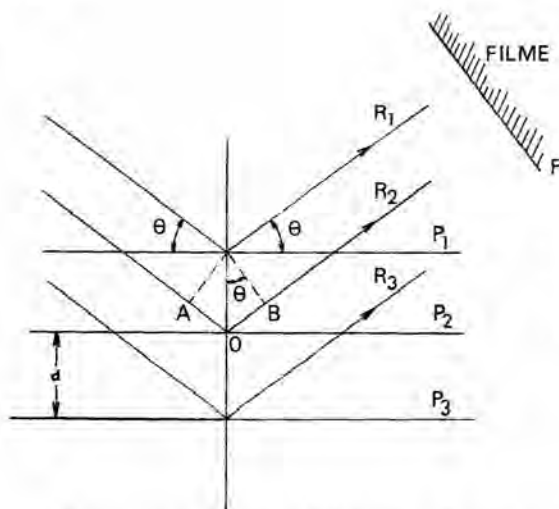



Figura 4.27 Vista de perfil do cristal da figura anterior, mostrando o conjunto de planos paralelos $P_1, P_2, \ldots$

Para que os raios refletidos produzam uma imagem, entretanto, é preciso que estejam *em fase*, isto é, que a diferença de percurso entre eles seja igual a um múltiplo inteiro do comprimento de onda da radiação utilizada. De acordo com a Fig. 4.27, a diferença de percurso entre os raios refletidos por dois planos vizinhos é dada por

$$e = \overline{AO} + \overline{OB} = 2d \operatorname{sen} \theta. \qquad \text{(Eq. 4.1)}$$

Assim a condição para que os planos paralelos $P_1, P_2, \ldots$ produzam uma imagem na placa fotográfica é expressa pela seguinte equação:

$$2d \operatorname{sen} \theta = n\lambda, \qquad \text{(Eq. 4.2)}$$

onde d é a distância entre os planos, θ é o ângulo de incidência da radiação, n é qualquer número inteiro e λ é o comprimento de onda da radiação. A Eq. 4.2 é chamada de *Lei de Bragg* em homenagem ao físico inglês W. L. Bragg, que a deduziu em 1913 (Bragg, 1913).

De acordo com a Lei de Bragg, um conjunto de planos paralelos do cristal só produz uma imagem na placa fotográfica para certos ângulos θ da radiação incidente, que satisfaçam à Eq. 4.2. Por outro lado, como vimos nos parágrafos anteriores, um cristal possui muitas famílias de planos paralelos. Assim, variando o ângulo de incidência, podemos obter as imagens correspondentes a várias famílias de planos. A análise dessas imagens permite deduzir a estrutura do cristal e sua orientação em relação ao feixe incidente.

Na verdade a Lei de Bragg exprime apenas uma *condição necessária* para que o feixe difratado produza uma imagem. Isso porque sua dedução se baseia apenas na periodicidade da rede cristalina, sem levar em conta os átomos que estão associados a cada ponto da rede. Assim, a Lei de Bragg pode ser satisfeita sem que apareça ponto algum na placa fotográfica.

A influência da base do cristal pode ser incorporada ao estudo do fenômeno de difração através da introdução de dois fatores. O primeiro, chamado *fator de estrutura*, representa a influência puramente geométrica dos átomos da base e portanto não depende do tipo do átomo considerado. O segundo, o chamado

fator de forma, é uma medida do poder de espalhamento dos átomos que constituem a base. Para uma discussão elementar desses dois fatores, consulte por exemplo Kittel (1967). Um estudo mais completo pode ser encontrado em Azaroff (1968).

EXERCÍCIOS

(*)4.1. O ouro tem uma massa específica de 19,32 g/cm^3, um peso atômico de 197,0 e uma estrutura cúbica de faces centradas. (a) Calcule o número de átomos de ouro por centímetro cúbico; (b) Calcule a constante de rede.

4.2. O sistema tetragonal de faces centradas é equivalente a um dos 14 tipos de rede cristalina ilustrados nas Figs. 4.5 a 4.11. Qual é esse tipo?

4.3. Calcule a distância entre dois átomos vizinhos em um cristal de silício.

(*)4.4. Calcule o valor do ângulo existente entre as ligações tetraédricas de um cristal de Si. Esse valor difere para o caso do Ge e do diamante?

4.5. Prove que em um cristal cúbico o plano definido pelos índices (hkl) é sempre perpendicular à direção $[hkl]$.

4.6. Mostre as posições atômicas do Ga e do As nos planos (1 1 0) e (1 0 0) de um cristal de GaAs.

(*)4.7. Quais os planos que contêm os três tipos de direções de baixo índice, [1 0 0], [1 1 0] e [1 1 1]?

4.8. Em uma experiência de difração, quais as condições que devem ser satisfeitas para que se tenha uma imagem na chapa fotográfica, correspondente a um conjunto de planos paralelos?

4.9. Lembrando que a luz visível está na faixa de comprimentos de onda de 400 a 800 nm, explique por que não se pode usar luz visível para estudar a rede cristalina de um cristal por difração.

REFERÊNCIAS

AZAROFF, L. V., *Elements of X-Ray Crystallography* (New York: McGraw-Hill, 1966), Cap. 8.

BRAGG, W. L., "Structure of Some Crystals as Indicated by their Diffraction of X-Rays", *Proc. Roy. Soc.* **A 89**, 248 (1913).

KITTEL, C., *Introduction to Solid State Physics* (New York: John Wiley, 1967), Cap. 2.

BIBLIOGRAFIA

Kittel, C., *Introduction to Solid State Physics* (New York: John Wiley, 1967), Cap. 1.

Wang, S., *Solid State Electronics* (New York: McGraw-Hill, 1966), Cap. 2.

5 Aplicação da mecânica quântica a um cristal

Neste capítulo vamos aplicar as idéias desenvolvidas nos capítulos anteriores ao estudo dos estados de energia dos elétrons em um cristal. O problema, em sua forma geral, é extremamente complexo, pois os elétrons, além de serem atraídos pelos núcleos dos átomos que formam a rede cristalina, são repelidos pelos outros elétrons. No caso de um cristal, a equação de Schroedinger assume a forma

$$\sum_{i,j}\left\{\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial^2}{\partial x_i^2}+\frac{\partial^2}{\partial y_i^2}+\frac{\partial^2}{\partial z_i^2}\right]\psi+\left[E-V(\vec{r}_{ij})\right]\psi\right\}=0 \qquad \text{(Eq. 5.1)}$$

que é uma generalização da Eq. 2.17.

Na Eq. 5.1, os índices i e j são usados para distinguir as coordenadas dos diferentes elétrons e o somatório se estende a todos os elétrons do cristal.

A energia potencial $V(\vec{r}_{ij})$ pode ser decomposta em dois termos, um que só depende da posição do elétron i, $V_1(\vec{r}_i)$, e que corresponde à energia potencial do elétron i no campo elétrico dos núcleos dos átomos do cristal, e um segundo termo, $V_2(\vec{r}_{ij})$, que corresponde à energia potencial do elétron i no campo elétrico de todos os outros elétrons e que portanto depende da posição de todos os elétrons do cristal.

Se o termo $V_2(\vec{r}_{ij})$ da energia potencial fosse desprezível, a Eq. 5.1 assumiria a forma

$$\sum_{i}\left\{\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial^2}{\partial x_i^2}+\frac{\partial^2}{\partial y_i^2}+\frac{\partial^2}{\partial z_i^2}\right]\psi+\left[E-V_1(\vec{r}_i)\right]\psi\right\}=0. \qquad \text{(Eq. 5.2)}$$

Vamos agora demonstrar que a solução da Eq. 5.2 pode ser escrita na forma

$$\psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2,\ldots,\vec{r}_n)=\psi_1(\vec{r}_1)\cdot\psi_2(\vec{r}_2)\cdot\psi_3(\vec{r}_3)\ldots\psi_n(\vec{r}_n), \qquad \text{(Eq. 5.3)}$$

onde $\psi_1(r_1)$, $\psi_2(r_2),\ldots,\psi_k(r_k),\ldots,\psi_n(r_n)$ satisfazem a equações do tipo

$$\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial^2}{\partial x_k^2}+\frac{\partial^2}{\partial y_k^2}+\frac{\partial^2}{\partial z_k^2}\right]\psi_k(\vec{r}_k)+\left[E_k-V_1(\vec{r}_k)\right]=0 \quad k=1,2,\ldots,n. \qquad \text{(Eq. 5.4)}$$

Para isso vamos substituir a Eq. 5.3 na Eq. 5.2. Fazendo isso, temos

$$\sum_{i}\left\{\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial^2}{\partial x_i^2}+\frac{\partial^2}{\partial y_i^2}+\frac{\partial^2}{\partial z_i^2}\right]\psi_1(\vec{r}_1)\cdot\psi_2(\vec{r}_2)\ldots\psi_k(\vec{r}_k)\ldots\right.$$

$$\left.\ldots\psi_n(\vec{r}_n)+\left[E-V_1(\vec{r}_i)\right]\psi_1(\vec{r}_1)\,\psi_2(\vec{r}_2)\ldots\psi_k(\vec{r}_k)\ldots\psi_n(\vec{r}_n)\right\}=0. \qquad \text{(Eq. 5.5)}$$

Ora, é evidente que

$$\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial^2}{\partial x_1^2}+\frac{\partial^2}{\partial y_1^2}+\frac{\partial^2}{\partial z_1^2}\right]\psi_1(\vec r_1)\,\psi_2(\vec r_2)\ldots\psi_k(\vec r_k)\ldots\psi_n(\vec r_n)=$$
$$=\frac{\hbar^2}{2m}\psi_2(\vec r_2)\ldots\psi_k(\vec r_k)\ldots\psi_n(\vec r_n)\left[\frac{\partial^2}{\partial x_1^2}+\frac{\partial^2}{\partial y_1^2}+\frac{\partial^2}{\partial z_1^2}\right]\psi_1(\vec r_1)$$

$$\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial^2}{\partial x_2^2}+\frac{\partial^2}{\partial y_2^2}+\frac{\partial^2}{\partial z_2^2}\right]\psi_1(\vec r_1)\,\psi_2(\vec r_2)\ldots\psi_k(\vec r_k)\ldots\psi_n(\vec r_n)=$$
$$=\frac{\hbar^2}{2m}\psi_1(\vec r_1)\cdot\psi_3(\vec r_3)\ldots\psi_k(\vec r_k)\ldots\psi_n(\vec r_n)\times$$
$$\times\left[\frac{\partial^2}{\partial x_2^2}+\frac{\partial^2}{\partial y_2^2}+\frac{\partial^2}{\partial z_2^2}\right]\psi_2(\vec r_2).$$

Ou, de modo geral,

$$\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial^2}{\partial x_k^2}+\frac{\partial^2}{\partial y_k^2}+\frac{\partial^2}{\partial z_k^2}\right]\psi_1(\vec r_1)\cdot\psi_2(\vec r_2)\ldots\psi_k(\vec r_k)\ldots\psi_n(\vec r_n)=$$
$$=\frac{\hbar^2}{2m}\psi_1(\vec r_1)\ldots\psi_{k-1}(\vec r_{k-1})\cdot\psi_{k+1}(\vec r_{k+1})\ldots\psi_n(\vec r_n)\times$$
$$\times\left[\frac{\partial^2}{\partial x_k^2}+\frac{\partial^2}{\partial y_k^2}+\frac{\partial^2}{\partial z_k^2}\right]\psi_k(\vec r_k).\qquad\text{(Eq. 5.6)}$$

Ora, de acordo com a Eq. 5.4,

$$\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial^2}{\partial x_k^2}+\frac{\partial^2}{\partial y_k^2}+\frac{\partial^2}{\partial z_k^2}\right]\psi_k(\vec r_k)=\left[V_1(\vec r_k)-E_k\right]\psi(\vec r_k).\qquad\text{(Eq. 5.7)}$$

Substituindo a Eq. 5.7 na Eq. 5.6, temos

$$\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial^2}{\partial x_k^2}+\frac{\partial^2}{\partial y_k^2}+\frac{\partial^2}{\partial z_k^2}\right]\psi_1(\vec r_1)\,\psi_2(\vec r_2)\ldots\psi_k(\vec r_k)\ldots\psi_n(\vec r_n)=$$
$$=[V_1(\vec r_k)-E_k]\,\psi_1(\vec r_1)\ldots\psi_{k-1}(\vec r_{k-1})\,\psi_k(\vec r_k)\,\psi_{k+1}(\vec r_{k+1})\ldots\psi_n(\vec r_n)=$$
$$=[V_1(\vec r_k)-E_k]\,\psi(\vec r_1,\vec r_2,\ldots,\vec r_n).\qquad\text{(Eq. 5.8)}$$

Substituindo a Eq. 5.8 na Eq. 5.2, temos

$$\sum_i\left\{\left[V_1(\vec r_i)-E_i\right]\psi+\left[E-V_1(\vec r_i)\right]\right\}\psi=0,$$

equação que é satisfeita para

$$E=\sum_i E_i.\qquad\text{(Eq. 5.9)}$$

Assim a solução da Eq. 5.2 é

$$\psi(\vec r_1,\vec r_2,\ldots,\vec r_n)=\psi_1(\vec r_1)\,\psi_2(\vec r_2)\ldots\psi_n(\vec r_n),\qquad\text{(Eq. 5.10)}$$

e a energia total é dada por

$$E=E_1+E_2+\cdots+E_n,\qquad\text{(Eq. 5.11)}$$

onde $E_1, E_2, \ldots, E_n$ são as energias individuais dos elétrons.

O uso da Eq. 5.10 implica que a probabilidade de encontrar o elétron i no ponto r_i: $|\psi_i|^2$, depende apenas de $\vec{r}_i$, isto é, da coordenada do elétron i em relação a uma origem arbitrária. Naturalmente, se existe uma interação entre o elétron i e o elétron j, a densidade de probabilidade do elétron i envolve também as coordenadas do elétron j. Mesmo assim, na aproximação de "um elétron", muito usada na prática, supomos que uma função produto como a da Eq. 5.10 é uma boa aproximação para a função de onda.

Nessa aproximação de "um elétron", a equação de Schroedinger se reduz a

$$\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right]\psi_k(\vec{r})+[E_k-V(\vec{r})]\,\psi_k(\vec{r})=0, \qquad \text{(Eq. 5.12)}$$

onde $V(\vec{r})$ é o potencial no qual o elétron está se movendo (potencial dos núcleos dos átomos do cristal) e o índice k serve para distinguir as diferentes soluções. A Eq. 5.12 se aplica a qualquer elétron do cristal, isto é, o somatório da Eq. 5.1 foi transformado em um sistema de n equações idênticas, quando desprezamos o termo $V_2(\vec{r}_{ij})$. Assim podemos estudar o movimento de cada elétron como se ele estivesse sozinho na rede cristalina (núcleos) e daí o nome de aproximação de "um elétron".

Devido à regularidade da disposição dos núcleos em um cristal, o potencial $V(\vec{r})$ é periódico no espaço. Essa periodicidade, por sua vez, impõe certas restrições à forma das soluções da Eq. 5.12. Essas restrições são expressas pelo Teorema de Bloch, que é demonstrado no Apêndice A.

O Teorema de Bloch diz que a solução mais geral da equação de Schroedinger para um elétron em um cristal é da forma

$$\psi_k(\vec{r})=e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}\mu_k(\vec{r}), \qquad \text{(Eq. 5.13)}$$

onde $\mu_k(\vec{r})$ é uma função com a mesma periodicidade espacial que a rede cristalina.

A única restrição imposta à função $\mu_k(\vec{r})$ pelo Teorema de Bloch é que ela deve ter a periodicidade da rede cristalina. Sua forma detalhada depende da forma do potencial $V(\vec{r})$ da Eq. 5.12. Vamos agora examinar o caso simples de um cristal de uma dimensão apenas e verificar qual a forma assumida pela função $\mu_k(\vec{r})$.

5.1. CRISTAL DE UMA DIMENSÃO

Consideremos um átomo ionizado e um elétron. O potencial do elétron no campo do átomo ionizado é dado por

$$V=-\frac{q^2}{r}, \qquad \text{(Eq. 5.14)}$$

onde r é a distância entre o elétron e o núcleo do átomo ionizado. Esse potencial está representado na Fig. 5.1.

Consideremos agora um "cristal unidimensional", isto é, o conjunto formado por uma linha de átomos ionizados e uma série de elétrons. O potencial de qualquer um desses elétrons no campo dos átomos ionizados está representado na Fig. 5.2.

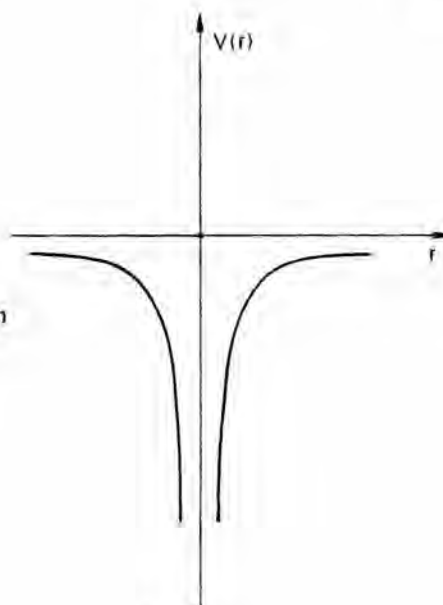



Figura 5.1 Energia potencial de um elétron nas vizinhanças de um átomo ionizado

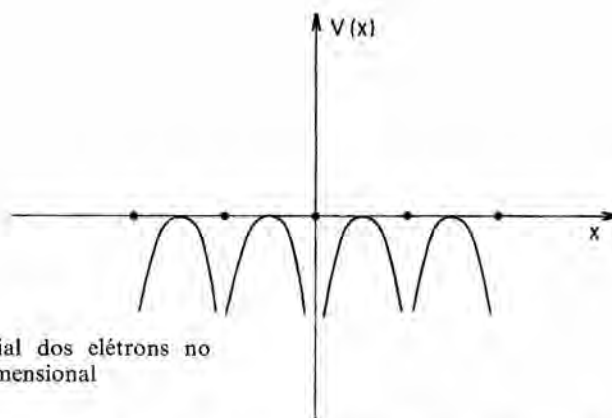



Figura 5.2 Energia potencial dos elétrons no interior de um cristal unidimensional

Como para um potencial desse tipo não existe solução analítica da equação de Schroedinger, vamos substituí-lo por um potencial que, em certas condições, se parece com o potencial do cristal, e para o qual a equação de Schroedinger apresenta uma solução simples. Nesse modelo, mostrado na Fig. 5.3 e sugerido por Krönig e Penney (1931), o potencial periódico consiste em um número infinito de barreiras de potencial de largura b, com regiões de potencial zero de largura a entre as barreiras. A altura das barreiras é V_0 (Fig. 5.3).

A equação de Schroedinger do sistema será

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + [E - V(x)]\,\psi = 0, \qquad \text{(Eq. 5.15)}$$

onde E é a energia do elétron, m a massa do elétron e $V(x)$ a energia potencial.

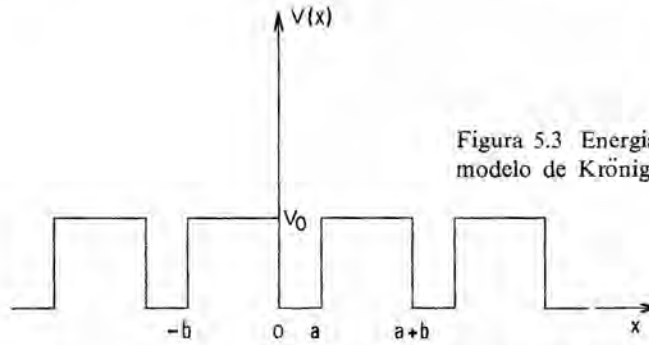



Figura 5.3 Energia potencial dos elétrons no modelo de Krönig-Penney

Na região $0 < x < a$, $V = 0$, a solução da Eq. 5.15 assume a forma

$$\psi_1(x) = Ae^{i\beta x} + Be^{-i\beta x}, \qquad \text{(Eq. 5.16)}$$

onde $\beta = \sqrt{2\,Em}/\hbar$. Na região $0 > x > -b$, $V = V_0$ e $E - V_0 < 0$; assim, a solução assume a forma

$$\psi_2(x) = Ce^{\alpha x} + De^{-\alpha x}, \qquad \text{(Eq. 5.17)}$$

onde $\alpha = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$. Os coeficientes A, B, C e D são relacionados entre si pelas condições de fronteira. Como o valor de $E - V(x)$ é finito na fronteira, a derivada $d\psi/dx$ e a própria função ψ devem ser contínuas na fronteira $x = 0$. Em outras palavras,

$$\begin{aligned} A + B &= C + D, \\ i\beta(A - B) &= \alpha(C - D). \end{aligned} \qquad \text{(Eq. 5.18)}$$

No caso de um cristal de uma dimensão, a Eq. 5.13 se torna

$$\psi(x) = e^{ikx}\mu(x). \qquad \text{(Eq. 5.19)}$$

Como $\mu(x)$ tem a mesma periodicidade que a rede cristalina,

$$\mu(x) = \mu(x + a + b).$$

Então

$$\psi(x + a + b) = e^{ik(a+b)}e^{ikx}\mu(x) = e^{ik(a+b)}\psi(x).$$

Assim, a solução na região $a < x < a + b$ é da forma

$$\psi_3(x + a + b) = e^{ik(a+b)}\psi_2(x)$$

ou:

$$\psi_3(x) = e^{ik(a+b)}\psi_2(x - a - b).$$

As condições de fronteira em $x = a$ são portanto

$$\begin{aligned} Ae^{i\beta a} + Be^{-i\beta a} &= (Ce^{-\alpha b} + De^{\alpha b})e^{ik(a+b)}, \\ i\beta(Ae^{i\beta a} - Be^{-i\beta a}) &= \alpha(Ce^{-\alpha b} - De^{\alpha b})e^{ik(a+b)}. \end{aligned} \qquad \text{(Eq. 5.20)}$$

Para uma solução não-trivial, o determinante dos coeficientes deve ser nulo e portanto (Prob. 5.1)

$$\frac{\alpha^2 - \beta^2}{2\alpha\beta}\,\text{senh}\,\alpha b\,\text{sen}\,\beta a + \cosh\alpha b\cos\beta a = \cos k(a + b). \qquad \text{(Eq. 5.21)}$$

Em princípio, a Eq. 5.21 nos dá a energia para qualquer valor de k, ou o valor de k associado a uma energia particular E. Embora a Eq. 5.21 seja complicada demais para permitir uma solução analítica, podemos observar que a um valor de k correspondem vários valores diferentes de energia.

Para simplificar o problema, vamos fazer b tender a zero e V_0 tender a infinito, de modo que o produto bV_0 se mantenha finito. Nesse caso, a Eq. 5.21 se reduz a

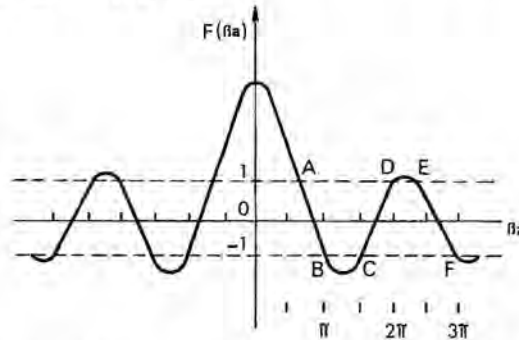
$$\rho \frac{\text{sen}\, \beta a}{\beta a} + \cos \beta a = \cos ka \qquad \text{(Eq. 5.22)}$$

onde

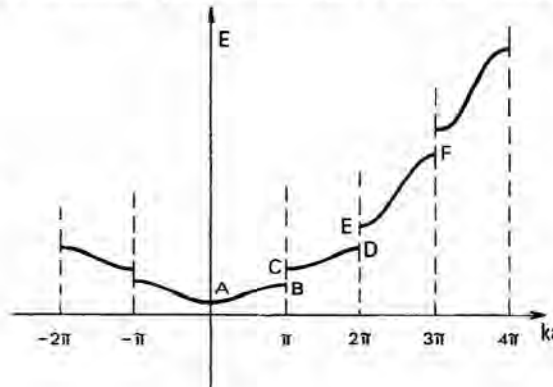
$$\rho = \frac{ab\alpha^2}{2}.$$

Na Fig. 5.4, desenhamos o lado esquerdo da Eq. 5.22 em função de βa. Como $|\cos ka| \leq 1$, só são permitidos os valores de βa para os quais o lado esquerdo da Eq. 5.22 esteja entre −1 e 1. Dentro dessa faixa, para cada valor de βa existe um valor correspondente de ka (Fig. 5.4).

Figura 5.4 Representação gráfica da função:

$$F(\beta\alpha) = \rho \frac{\text{sen}\, \beta a}{\beta a} + \cos \beta a$$

Como β está diretamente relacionado à energia E do elétron, é possível obter, a partir da Fig. 5.4, um gráfico de E em função de ka. Esse gráfico aparece na Fig. 5.5.

Os trechos AB, CD, EF, etc. das Figs. 5.4 e 5.5 são chamados de *faixas permitidas de energia* porque os elétrons que possuem essas energias podem propagar-se livremente no cristal. Por outro lado, os elétrons com energias entre B e C, C e D, etc., devem ter um k imaginário para satisfazerem à Eq. 5.22. Assim

Figura 5.5 Energia E dos elétrons em função de ka

o movimento dos elétrons é muito atenuado e eles encontram grande dificuldade para se propagarem no cristal. Essas faixas de energia são chamadas de *faixas proibidas de energia.*

5.2. CONDUTORES, ISOLANTES, SEMICONDUTORES

O que dissemos no parágrafo anterior pode ser generalizado para um cristal tridimensional. Assim ficamos sabendo que um elétron em um cristal só pode se propagar se sua energia estiver dentro de uma das faixas permitidas.

Em um cristal, os elétrons tendem a ocupar sempre os estados de menor energia. Assim as faixas permitidas mais baixas estão sempre cheias. Suponhamos que o número de elétrons no cristal seja suficiente para encher completamente um certo número de faixas permitidas, deixando as outras vazias. Nesse caso os elétrons do cristal, quando submetidos a um campo elétrico, não podem se propagar, pois qualquer movimento aumentaria sua energia, colocando-os dentro da faixa proibida. Nesse caso dizemos que o cristal é um *isolante*. Se, por outro lado, os elétrons enchem apenas parcialmente uma das faixas permitidas, os elétrons podem mover-se com facilidade sob a ação de campos elétricos, passando para estados de energia ligeiramente maior. Nesse caso, o cristal pode ser um *condutor*, um *semicondutor* ou um *semimetal*. Em um *condutor*, as faixas permitidas parcialmente cheias possuem um grande número de elétrons. Em um *semicondutor* ou *semimetal*, as faixas parcialmente cheias possuem um pequeno número de elétrons ou estão quase completamente cheias; em ambos os casos, a condução de corrente é menor que nos metais. A diferença entre um semicondutor e um semimetal é que na temperatura do zero absoluto um semicondutor se torna isolante, enquanto um semimetal continua a conduzir corrente.

EXERCÍCIOS

5.1. Forme um determinante com os coeficientes A, B, C e D das Eqs. 5.18 e 5.20. Em seguida, forme um novo determinante somando e subtraindo as colunas da seguinte forma: $1' = (1-2)/2i$; $2' = (1+2)/2$; $3' = (3+4)/2$; $4' = (4-3)/2$, onde os números 1, 2, 3 e 4 representam as colunas do antigo determinante e os números $1', 2', 3'$ e $4'$ representam as colunas do novo determinante. Prove a Eq. 5.21 expandindo o novo determinante.

5.2. Faça um gráfico de $F(\beta a) = (\rho/\beta a)\,\text{sen}\,\beta a + \cos \beta a$, Eq. 5.22, em função de βa, para $\rho = 3\pi/2$, como na Fig. 5.4. Em seguida, use o gráfico para obter os valores de ka para vários valores de βa. Use os valores de ka e βa para traçar o gráfico de $E = \beta^2 a^2/\pi^2$ em função de ka (Fig. 5.5).

5.3. Explique a diferença entre os níveis permitidos de energia em um átomo e os níveis permitidos de energia em um cristal.

REFERÊNCIAS

KRÖNIG, R. e PENNEY, W. G., *Proc. Roy. Soc.* **130**, 499 (1931).

BIBLIOGRAFIA

Blatt, F. J., *Physics of Electronic Conduction in Solids* (New York: McGraw-Hill, 1968), Cap. 4.

Hunter, L. P., "Electronic Conduction in Solids", in *Handbook of Semiconductor Electronics* (New York: McGraw-Hill, 1962).

6 Propriedades básicas dos materiais semicondutores

Como vimos no capítulo anterior, os semicondutores se caracterizam por apresentarem, à temperatura ambiente, uma resistividade intermediária entre a dos metais e a dos isolantes. Na prática, os semicondutores mais usados são o germânio e o silício, dois elementos cuja estrutura cristalina já foi descrita no Cap. 4.

Neste capítulo vamos examinar mais de perto as propriedades que fazem do germânio e do silício materiais semicondutores.

6.1. ESTABILIDADE DAS SUBSTÂNCIAS CRISTALINAS

A Mecânica quântica permitiu explicar a estabilidade das substâncias cristalinas à luz da estrutura eletrônica dos átomos. Para compreendermos por que os átomos se unem para formar um cristal, consideremos primeiramente o caso dos gases raros.

Os gases raros são os elementos mais estáveis da natureza; praticamente não participam de reação química alguma. Ora, examinando a estrutura eletrônica dos gases raros (Tab. 6.1), notamos uma peculiaridade; com exceção do hélio, a última camada de todos os gases raros contém exatamente 8 elétrons.

Tabela 6.1 Estrutura eletrônica dos gases raros

Hélio :	K^2
Neônio :	K^2L^8
Argônio :	$K^2L^8M^8$
Criptônio:	$K^2L^8M^{18}N^8$
Xenônio :	$K^2L^8M^{18}N^{18}O^8$
Radônio :	$K^2L^8M^{18}N^{32}O^{18}P^8$

Na verdade, é possível demonstrar que não se trata de uma coincidência; para ser quimicamente estável, um átomo de número atômico maior que 2 deve ter oito elétrons na última camada (camada de valência). É por isso que todos os elementos, exceto os gases raros, são quimicamente ativos; unindo-se em moléculas ou cristais, os átomos dos elementos ativos redistribuem seus elétrons de tal forma que cada átomo fica efetivamente com 8 elétrons na camada de valência.

Assim, por exemplo, o sódio e o cloro possuem as seguintes estruturas atômicas:

$$\text{Sódio: } K^2L^8M^1,$$
$$\text{Cloro: } K^2L^8M^7.$$

Quando esses elementos se unem para formar o cloreto de sódio, cada átomo de sódio cede um elétron a um átomo de cloro. Assim a rede cristalina

do cloreto de sódio é constituída na realidade por íons de cloro e de sódio, com a seguinte estrutura eletrônica:

$$\text{Íon de sódio: } K^2L^8,$$
$$\text{Íon de cloro: } K^2L^8M^8.$$

Repare que tanto os íons de sódio como os íons de cloro possuem 8 elétrons na camada de valência.

Esse tipo de ligação, em que um átomo cede um ou mais elétrons a outro átomo, é chamado de *ligação iônica.*

6.2. LIGAÇÕES COVALENTES

Nos cristais de germânio e silício, os átomos são unidos por um tipo mais complexo de ligação, a chamada *ligação covalente.* Para compreendermos melhor a natureza da ligação covalente, consideremos o tetraedro formado pelos átomos mais próximos de um átomo qualquer de um cristal de germânio ou silício (Fig. 6.1)(*).

Como vimos no Cap. 3, tanto o silício como o germânio possuem 4 elétrons na camada de valência. De acordo com a discussão precedente, é de se esperar que quando os átomos de um desses elementos se unem para formar um cristal, os elétrons sejam redistribuídos de modo que cada átomo fique com 8 elétrons de valência.

No caso de uma estrutura como a da Fig. 6.1, uma redistribuição do tipo ligação iônica seria obviamente impossível, já que todos os átomos são do mesmo elemento. O que acontece é que cada elétron da camada de valência passa a pertencer simultaneamente a dois átomos. Esse tipo de ligação é chamado de *ligação covalente.*

Vamos esclarecer melhor a situação. O átomo A da Fig. 6.1 possui 4 elétrons na camada de valência. Cada um desses elétrons pertence também a um dos átomos vizinhos. Do mesmo modo, um elétron de cada átomo vizinho pertence também ao átomo A. Assim o átomo A passa a dispor de oito elétrons em sua camada de valência. O mesmo ocorre para todos os outros átomos do cristal.

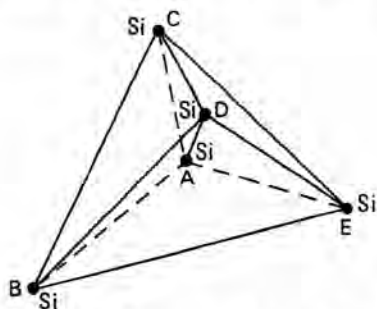



Figura 6.1 Átomo de silício localizado no centro do tetraedro formado pelos 4 átomos vizinhos

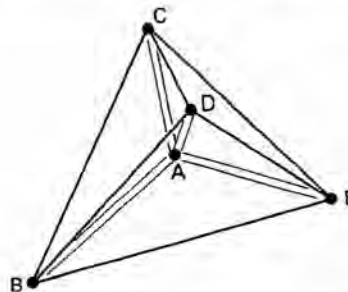
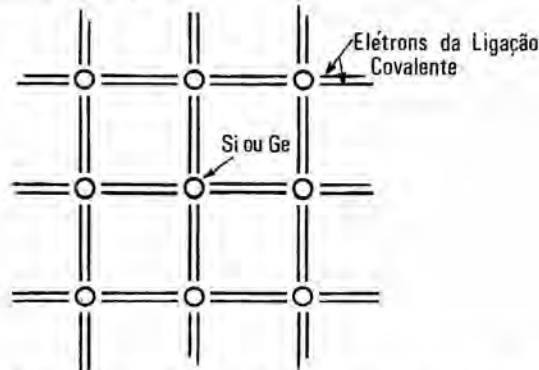



Figura 6.2 Representação esquemática das ligações covalentes de um cristal de germânio ou silício

(*)A estrutura cristalina do germânio e do silício já foi discutida no Cap. 4

Na Fig. 6.2 as ligações covalentes estão representadas por segmentos de reta que unem os átomos envolvidos. Cada segmento de reta representa um dos elétrons que participam da ligação.

Embora permita uma visualização mais precisa da estrutura do cristal, a representação tridimensional da Fig. 6.2 é desnecessariamente complexa. Para estudarmos as propriedades básicas dos semicondutores, podemos usar uma representação bidimensional, como a da Fig. 6.3.

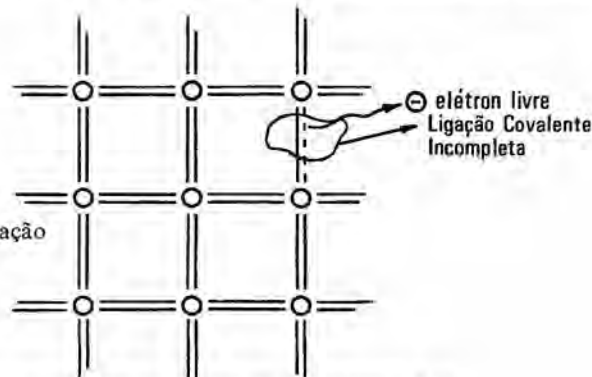
Figura 6.3 Representação bidimensional de um cristal de Si ou Ge

Repare que a representação bidimensional reproduz corretamente as posições relativas dos átomos e ligações covalentes, mas que os ângulos entre as ligações são alterados. Entretanto esses ângulos não são importantes para as propriedades que vamos estudar.

6.3. ELÉTRONS E BURACOS

Como os elétrons de valência dos semicondutores formam pares covalentes, eles não são normalmente livres como no caso dos metais. Na verdade em temperaturas muito baixas, próximas do zero absoluto, em que as ligações covalentes se mantêm praticamente intactas, o cristal se comporta como um isolante.

Entretanto à medida que a temperatura cresce, algumas ligações covalentes se rompem, devido à agitação térmica(*).

Na Fig. 6.4 vemos um cristal em que uma das ligações covalentes deixou de existir.

Figura 6.4 Quebra de uma ligação covalente

(*)Fenômeno conhecido como geração térmica e estudado no parágrafo 6.3.1

Em conseqüência, um dos elétrons ficou livre para vagar por todo o cristal, e ficou um "vazio" em uma das ligações covalentes do cristal. A ausência do elétron na ligação covalente está representada por uma linha tracejada. Esse "vazio" é chamado de *buraco*. Os buracos também podem servir para o transporte de cargas, pelo mecanismo que explicaremos em seguida.

Quando uma ligação covalente está incompleta, isto é, quando existe um *buraco*, o elétron de um átomo vizinho pode deixar sua ligação covalente e vir preencher esse "vazio". Com isso, entretanto, o elétron deixa um buraco em sua posição original, que por sua vez pode ser preenchido por outro elétron. Assim um buraco pode "caminhar" por um cristal, na direção contrária à do movimento dos elétrons que procuram "enchê-lo".

No que se refere ao transporte de cargas, o buraco se comporta como uma carga positiva, com o mesmo valor absoluto da carga do elétron. Na verdade, para simplificar o estudo, podemos considerar o buraco como uma entidade real; é preciso ter sempre em mente, entretanto, que se trata de um artifício e que os buracos não passam de "vazios" nas ligações covalentes do cristal. Outro ponto que vale a pena destacar é o seguinte: o movimento dos elétrons e o movimento dos buracos se realiza de modo diferente — enquanto os elétrons caminham no cristal de forma mais livre, os buracos só podem passar de ligação covalente para ligação covalente. É por isso que a velocidade com que os elétrons se movem no interior do cristal é em geral maior do que a dos buracos[*].

6.3. GERAÇÃO E RECOMBINAÇÃO

6.3.1. Geração térmica

Definimos como geração térmica o processo de criação de pares elétron-buraco em um cristal pela rutura de ligações covalentes devido à agitação térmica da rede cristalina. À medida que a temperatura de um cristal aumenta, a partir do zero absoluto (0 K), os átomos da rede começam a vibrar em torno de suas posições ideais, fazendo variar as distâncias entre os átomos e os ângulos entre as ligações covalentes.

Quanto maior a temperatura, maior a amplitude das oscilações. Parte da energia das oscilações é transferida para os elétrons de valência dos átomos da rede. Alguns dos elétrons recebem energia suficiente para abandonarem a ligação covalente de que participam. Naturalmente a rutura de uma ligação covalente resulta na criação de um elétron livre e um buraco.

Para descrevermos a criação de pares elétron-buraco pela agitação térmica da rede, definimos a chamada *taxa de geração térmica*, $G(T)$, que representa o número de pares elétron-buraco criados no cristal, por unidade de volume e por unidade de tempo. Para um determinado material semicondutor, a taxa de geração térmica é função apenas da temperatura.

6.3.2. Recombinação

Definimos como recombinação a associação de um elétron a um buraco, com a reconstituição de uma ligação covalente e a liberação de uma certa quan-

[*] O parâmetro conhecido como mobilidade, que será definido no Cap. 7, relaciona a velocidade dos elétrons (ou buracos) ao campo elétrico aplicado. Em geral, a mobilidade dos elétrons é maior que a dos buracos

tidade de energia. Essa energia pode ser irradiada (emissão de fótons) ou absorvida pela rede cristalina (emissão de fônons).

Embora os mecanismos da recombinação sejam bastante complexos, o fenômeno pode ser descrito por uma equação fenomenológica bastante simples. Como o processo de recombinação depende da presença simultânea de um elétron e um buraco em um mesmo ponto do cristal, a *taxa de recombinação*, *R*, é proporcional às concentrações de elétrons e buracos no cristal, isto é,(*)

$$R = \alpha n p \qquad \text{(Eq. 6.1)}$$

onde R é a taxa de recombinação, n e p são as concentrações de elétrons e buracos, respectivamente, e α um parâmetro que depende da temperatura e do mecanismo de recombinação considerado.

A Eq. 6.1 é chamada de Lei da Ação das Massas, por analogia com a lei que descreve a evolução das reações químicas.

6.3.3. Equilíbrio térmico

Dizemos que um sistema está em equilíbrio térmico quando sua temperatura é constante e uniforme.

Como vimos nos parágrafos anteriores, as concentrações de elétrons e buracos em um semicondutor dependem de dois processos competitivos, a geração térmica e a recombinação. Para uma dada temperatura, a taxa de geração térmica $G(T)$ tem um valor constante. Assim se o semicondutor estiver em equilíbrio térmico, o número de pares elétron-buraco gerados por unidade de tempo será constante. Ora, o número de elétrons e buracos no cristal não pode aumentar indefinidamente, já que, como vimos, a taxa de recombinação é diretamente proporcional às concentrações de elétrons e buracos. Em conseqüência, quando mantemos um semicondutor a uma temperatura constante durante um tempo suficientemente longo, as concentrações de elétrons e buracos assumem valores tais que a taxa de recombinação se torna exatamente igual à taxa de geração térmica:

$$G(T) = R = \alpha n p. \qquad \text{(Eq. 6.2)}$$

Naturalmente a Eq. 6.2 só é válida para um semicondutor em equilíbrio térmico.

6.4. SEMICONDUTORES INTRÍNSECOS

Até agora, supusemos implicitamente que o material semicondutor a que nos referíamos era um semicondutor *puro*, isto é, que não continha átomos de outros elementos (impurezas). Quando um semicondutor não contém impurezas em quantidade suficiente para alterar-lhe as propriedades, dizemos que se trata de um semicondutor *intrínseco*.

Em um semicondutor intrínseco, o número de elétrons é igual ao número de buracos, pois cada vez que uma ligação covalente é rompida ou formada, um par elétron-buraco é gerado ou eliminado no processo. Usando o índice i para indicar que se trata de um material intrínseco, podemos escrever

$$n = p = n_i. \qquad \text{(Eq. 6.3)}$$

(*)A taxa de recombinação é definida como o número de pares que se recombinam por unidade de volume e por unidade de tempo

O parâmetro n_i é chamado de concentração intrínseca dos portadores e é função da temperatura e do material considerado. A concentração intrínseca dos portadores de um semicondutor será calculada no Cap. 8.

6.5. SEMICONDUTORES EXTRÍNSECOS OU IMPUROS

A adição de pequenas quantidades de outras substâncias a um semicondutor pode modificar consideravelmente as propriedades do material. Essas impurezas podem substituir os átomos da rede cristalina (impurezas *substitucionais*) ou ocupar posições vagas entre os átomos da rede (impurezas *intersticiais*).

Na prática, as propriedades dos semicondutores são controladas através da adição de certas impurezas em concentrações cuidadosamente medidas. As impurezas substitucionais mais usadas são certos elementos pentavalentes (arsênio, fósforo, antimônio) e trivalentes (boro, alumínio, gálio, índio). As Figs. 6.5 e 6.6 mostram as representações esquemáticas dos átomos dessas impurezas.

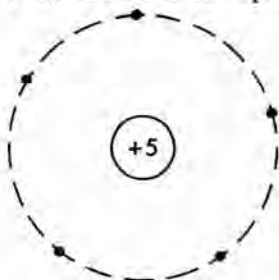



Figura 6.5 Representação esquemática do átomo de uma impureza pentavalente. Estão indicados os cinco elétrons de valência e a carga positiva equivalente associada à parte central do átomo. Nessa categoria estão o fósforo, o arsênio, o antimônio, etc.

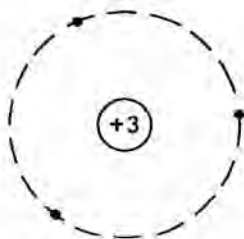



Figura 6.6 Representação esquemática do átomo de uma impureza trivalente. Estão indicados os três elétrons de valência e a carga equivalente associada à parte central do átomo. Nessa categoria estão o boro, o alumínio, o gálio, o índio, etc.

Vamos analisar primeiro o caso em que acrescentamos a um semicondutor puro (por exemplo, o silício) uma pequena quantidade de uma impureza pentavalente (por exemplo, o arsênio). Nesse caso, alguns átomos de arsênio ocupam o lugar dos átomos de silício no cristal. Entretanto um átomo de arsênio só tem quatro átomos vizinhos de silício para estabelecer ligações covalentes. Assim apenas quatro átomos de valência do arsênio ficam retidos nas ligações covalentes; o elétron que sobra fica praticamente livre para vagar pelo cristal, indo fazer companhia aos elétrons livres já existentes, provenientes da quebra das ligações covalentes dos átomos de silício. Na Fig. 6.7 vemos o que acontece no interior do cristal.

Como os átomos das impurezas pentavalentes cedem elétrons ao cristal, essas impurezas são chamadas de impurezas *doadoras* ou impurezas *tipo N* (a letra *N* é a inicial de *negativa*, referindo-se à carga do elétron).

Quando acrescentamos ao silício uma impureza trivalente – índio, por exemplo –, ocorre exatamente o oposto, pois como cada átomo de índio só

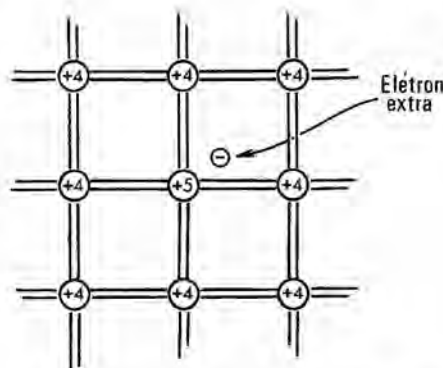
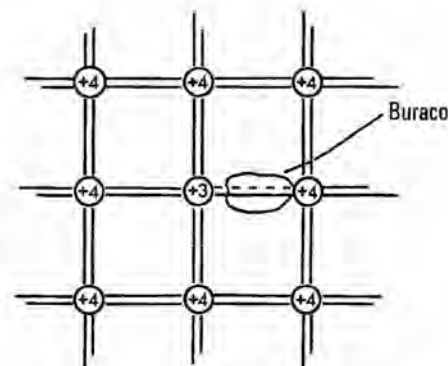
Figura 6.7 Impureza pentavelmente adicionada a um cristal de Si ou Ge. O elétron extra fica praticamente livre para se deslocar no cristal

possui três elétrons de valência e pode estabelecer ligações covalentes com quatro átomos vizinhos de silício, uma dessas ligações covalentes fica incompleta, isto é, fica "faltando" um elétron. Ora, como já vimos, a "falta" de um elétron em uma ligação covalente pode ser considerada como a "presença" de um buraco. A Fig. 6.8 mostra o efeito da adição de uma impureza trivalente a um cristal de silício ou germânio.

Figura 6.8 Impureza trivalente adicionada a um cristal de Si ou Ge. A ligação covalente incompleta corresponde a um buraco introduzido pela impureza

Como os átomos das impurezas trivalentes cedem buracos ao cristal (retiram elétrons do cristal), essas impurezas são chamadas de *impurezas aceitadoras* ou impurezas *tipo P* (a letra *P* é a inicial de *positiva*, referindo-se à carga do buraco).

Os elétrons livres e buracos de um semicondutor são chamados de *portadores*, pois é através deles que se realiza qualquer transporte de cargas de um ponto para outro do material. Como vimos, em um semicondutor intrínseco (puro) o número de elétrons é igual ao número de buracos.

Nos semicondutores tipo *N*, isto é, que contêm impurezas doadoras, pentavalentes, o número de elétrons é maior, naturalmente, que nos semicondutores intrínsecos. Além disso, o número de buracos é menor, pois havendo excesso de elétrons, os buracos têm maior oportunidade de se recombinarem. Nos semicondutores tipo *P*, contendo impurezas aceitadoras, trivalentes, ocorre o oposto; como a concentração de buracos é maior que a concentração de elétrons, o número de elétrons é menor que no material intrínseco.

O que dissemos anteriormente é demonstrado matematicamente no Cap. 8, onde provamos que

$$n \cdot p = n_i^2. \qquad \text{(Eq. 6.4)}$$

A Eq. 6.4 é válida para qualquer semicondutor, seja intrínseco, tipo N ou tipo P. Essa equação nos diz simplesmente que o produto das concentrações de elétrons e buracos em um semicondutor é igual a uma constante, n_i^2. Como vimos, a grandeza n_i pode ser definida como a concentração intrínseca de portadores para o material semicondutor em questão.

Assim o fato de acrescentarmos uma impureza a um semicondutor intrínseco não só aumenta o número total de portadores, mas também altera a proporção entre elétrons e buracos. Nos materiais tipo N, os elétrons são chamados de *portadores em maioria* e os buracos de *portadores em minoria*. Nos materiais tipo P, os papéis se invertem.

Como já vimos, para transformar um elétron firmemente preso a uma ligação covalente em elétron livre é necessário fornecer-lhe energia. Essa energia pode ser fornecida, por exemplo, sob a forma de calor. Assim quando dizemos que a agitação térmica rompe ligações covalentes, na verdade estamos afirmando que a energia térmica eleva alguns elétrons de valência a um nível mais alto de energia, tornando-os livres. Por que não acontece o mesmo nos isolantes? Por que nos metais, mesmo a temperaturas baixíssimas, existem muitos elétrons livres? Essas perguntas foram respondidas pela Mecânica quântica, como veremos no próximo parágrafo.

6.5. NÍVEIS DE ENERGIA NOS SEMICONDUTORES

No capítulo anterior, verificamos que em um sólido cristalino existem certas faixas de energias permitidas, separadas por faixas de energias proibidas, isto é, energias que os elétrons não podem assumir. No nosso caso, o que nos interessa são apenas duas faixas seguintes: a faixa dos elétrons firmemente presos às ligações covalentes, chamada de *faixa de valência*, e a faixa dos elétrons de valência que se tornaram elétrons livres, e que é chamada de *faixa de condução*.

Em um metal, não existem faixas proibidas entre a faixa de valência e a faixa de condução; as duas se superpõem parcialmente. Isso significa que em um metal, mesmo a temperatura muito baixa, há elétrons com suficiente energia para serem elétrons livres. Isso explica por que os metais são *condutores*. Nos isolantes, por outro lado, a faixa de valência está completa e é separada da faixa de condução por uma faixa proibida. Isso significa que para termos um elétron livre em um isolante, é preciso fornecermos a um elétron da faixa de valência suficiente energia para que ele passe para a faixa de condução. Entretanto a largura da faixa proibida nos isolantes é muito grande, isto é, a energia necessária para colocar um elétron na faixa de condução é elevada. Assim os isolantes praticamente não apresentam elétrons livres.

As Figs. 6.9(a) e 6.9(b) mostram como as bandas de energia estão dispostas nos metais e nos isolantes.

Nos semicondutores também existe uma faixa proibida, mas ela é muito mais estreita que no caso dos isolantes. A temperaturas muito baixas, os semicondutores se comportam como isolantes, pois seus elétrons não têm energia

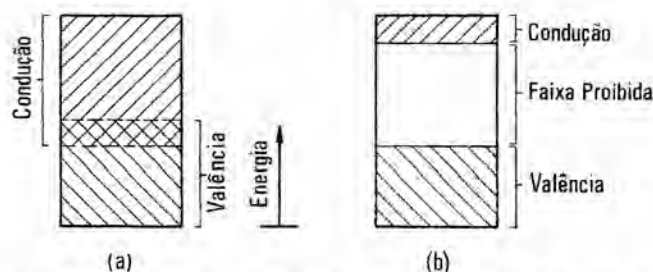



Figura 6.9 Faixas de energia (a) nos metais; (b) nos isolantes

suficiente para passarem para a faixa de condução. Nesse caso as ligações covalentes se mantêm intactas.

Quando aumentamos a temperatura, entretanto, alguns elétrons adquirem energia suficiente para transporem a faixa proibida e passarem para a faixa de condução, deixando buracos na faixa de valência.

As Figs. 6.10(a), (b) e (c) mostram o que acontece nos três tipos de semicondutores.

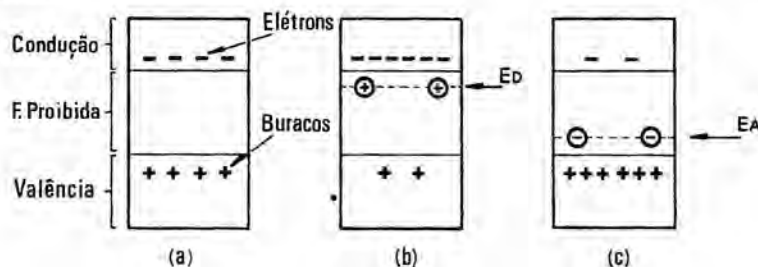



Figura 6.10 Faixas de energia nos semicondutores

A Fig. 6.10(a) corresponde ao caso de um semicondutor intrínseco ($n = p = n_i$). Como vimos, tanto os elétrons da faixa de condução como os buracos da faixa de valência contribuem para o transporte de carga.

Na Fig. 6.10(b) vemos a situação em um semicondutor do tipo *N*. Repare que a inclusão da impureza doadora deu origem a um nível permitido de energia (E_D) dentro da faixa proibida, próximo da faixa de condução. É nesse nível que estão os elétrons em excesso dos átomos doadores. Assim, à temperatura ambiente, quase todos esses elétrons adquirem energia suficiente para passarem para a faixa de condução e se tornarem "livres". Com isso os átomos dos doadores ficam positivamente carregados, como está indicado na Fig. 6.10(b). A situação da Fig. 6.10(b) é a mesma que a da Fig. 6.7.

Nos cristais do tipo *P*, em que as impurezas são aceitadoras, o nível permitido (E_A) está próximo da faixa de valência. Assim, os elétrons da faixa de valência podem passar com grande facilidade para o nível dos aceitadores, deixando buracos na faixa de valência. Com isso, os aceitadores ficam carregados negativamente, como está indicado na Fig. 6.10(c), que equivale à Fig. 6.8.

A Tab. 6.2 mostra as energias de ionização das impurezas mais comuns, expressas em elétrons-volt (Conwell, 1958).

Tabela 6.2 Energias de ionização em elétrons-volt (eV)

	Impurezas	Semicondutor	
		Silício	Germânio
D O A D O R A S	P	0,044	0,0120
	As	0,049	0,0130
	Sb	0,039	0,0096
	Li	0,033	0,0010
A C E I T A D O R A S	B	0,045	0,010
	Al	0,057	0,010
	Ga	0,065	0,011
	In	0,160	0,011

Condução
E_D
Valência

Condução
E_A
Valência

6.6. MASSAS EFETIVAS DOS ELÉTRONS E BURACOS EM UM SEMICONDUTOR

Como vimos nos parágrafos anteriores, existem dois tipos de portadores de carga em um material semicondutor, isto é, os elétrons e os buracos. Evidentemente o estudo do movimento desses portadores sob a ação de forças externas (produzidas, por exemplo, pela aplicação de campos elétricos) é extremamente complexo, pois os portadores estão também submetidos à influência dos átomos da rede cristalina, dos átomos das impurezas e dos outros portadores.

Uma maneira simples de resolver o problema é definir massas fictícias para os elétrons e buracos tais que a segunda lei de Newton ($F = ma$) seja satisfeita. Em outras palavras, *escolhemos* valores tais para as "massas" do elétron e do buraco que as relações

$$F_e = m_e a_e \quad \text{(Eq. 6.5)}$$

$$F_h = m_h a_h \quad \text{(Eq. 6.6)}$$

sejam satisfeitas.

Nas equações anteriores, F é a força *externa* aplicada, a_e e a_h são as acelerações dos elétrons e buracos e m_e e m_h são as chamadas *massas efetivas* dos elétrons e buracos, respectivamente(*) (Shockey, 1950).

(*)A massa efetiva do buraco é representada pelo símbolo m_h porque o buraco em inglês é chamado de *hole*

Na verdade o uso do conceito de massa efetiva só se justifica porque em um semicondutor as forças internas do cristal são várias ordens de grandeza maiores que as forças externas normalmente aplicadas. Em conseqüência, o uso de uma massa efetiva reflete adequadamente o efeito do cristal sobre o movimento dos portadores.

Repare que ao introduzirmos o conceito de massa efetiva estamos supondo que o cristal foi substituído por um meio homogêneo, no qual os elétrons e buracos se deslocam com as respectivas massas efetivas, satisfazendo às leis da *Mecânica clássica* e sujeitos apenas a forças *externas*.

As Figs. 6.11 e 6.12 ilustram melhor essa idéia.

Figura 6.11 Elétron de massa *real* m_0 deslocando-se no interior de um cristal semicondutor sob o efeito de um campo elétrico externo. Devemos aplicar as leis da Mecânica quântica

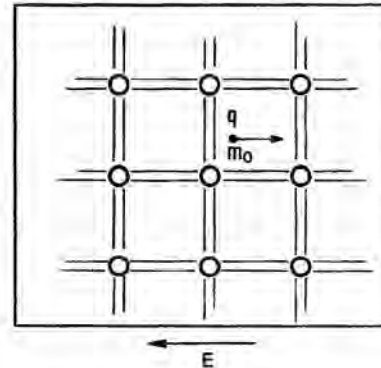
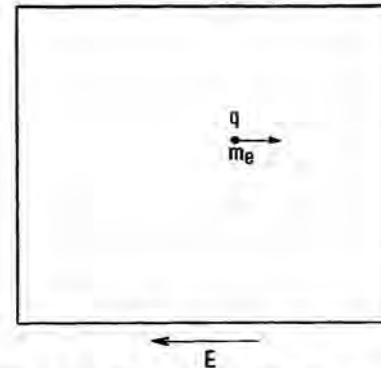



Figura 6.12 O cristal foi substituído por um meio homogêneo que não oferece resistência alguma ao movimento. A massa "real" foi substituída pela massa efetiva. Podemos aplicar as leis da Mecânica clássica

Na prática, as massas efetivas são determinadas com o auxílio da *ressonância de ciclotron* dos elétrons e buracos(*) (Lax e Mavroids, 1960).

Voltaremos ao conceito de massa efetiva no Cap. 8, quando calcularmos as concentrações de elétrons e buracos em um semicondutor.

EXERCÍCIOS

6.1. Verificamos a possibilidade da introdução de impurezas em um material semicondutor, transformando-o em um semicondutor tipo *P* ou tipo *N*, dependendo do

(*)O nome "ressonância de ciclotron" provém do fato de que os elétrons e buracos descrevem órbitas circulares no interior do cristal, sob o efeito de campos elétricos e magnéticos. O mesmo ocorre com as partículas carregadas no interior de um "ciclotron" (acelerador de partículas)

tipo de impureza adicionada. Entende-se por *solubilidade sólida* de uma impureza a máxima concentração dessa impureza que pode ser "dissolvida" no silício (ou germânio) sólido, a uma dada temperatura.

a) Procure explicar fisicamente por que colocamos entre aspas o termo "dissolvida";
b) A máxima solubilidade do arsênio no silício é da ordem de 2×10^{21} átomos/cm^3 (Trumbore, 1960). Qual a máxima concentração (%) de As que pode ser utilizada em um dispositivo semicondutor de silício?

6.2. Considere um material semicondutor em equilíbrio térmico, iluminado por um feixe de luz cuja freqüência pode ser variada. Um fotodetetor é usado para medir a luz que atravessa o cristal. Pense cuidadosamente e procure explicar o que deverá indicar o detetor, à medida que a freqüência da luz for variada.

6.3. Considere um material semicondutor a uma dada temperatura T. Suponha que um feixe de luz constante é aplicado a esse semicondutor. Chamando de $G(T)$ e $G(I)$ as taxas de geração devido à temperatura e à iluminação, respectivamente, qual a equação de equilíbrio do sistema?

REFERÊNCIAS

CONWELL, E. M., "Properties of Silicon and Germanium", *Proc. IRE* **46**, 1281 (1958).

LAX, B. e J. G. MAVROIDS, "Cyclotron Resonance" in F. Seitz and D. Turnbull (eds.), *Solid State Physics*, Vol. 11 (New York: Academic Press, 1960).

SHOCKLEY, W., *Electrons and Holes in Semiconductors* (New York: Van Nostrand, 1950).

TRUMBORE, F. A., "Solid Solubilities of Impurity Elements in Germanium and Silicon", *Bell Syst. Tech. J.* **39**, 205 (1960).

BIBLIOGRAFIA

Gibbons, J. F., *Semiconductor Electronics* (New York: McGraw-Hill, 1966), Cap. 4.

Grove, A. S., *Physics and Technology of Semiconductor Devices* (New York: John Wiley, 1967), Cap. 5.

7 Distribuições estatísticas

Já sabemos quais são os estados *permitidos* para os elétrons em um semicondutor. Neste capítulo, vamos investigar qual é a probabilidade de que esses estados estejam *ocupados*. Aproveitaremos a oportunidade para examinar as distribuições estatísticas de um modo geral.

7.1. NECESSIDADE DAS DISTRIBUIÇÕES ESTATÍSTICAS

O melhor meio de ilustrar a necessidade das distribuições estatísticas para o estudo das propriedades da matéria é apresentar algumas perguntas-chave, conforme segue.

a) Suponhamos que estamos estudando um sistema constituído por moléculas que não interagem entre si, a não ser através de choques (esse sistema é chamado de *gás perfeito*). A pergunta que temos a fazer é a seguinte: qual é a distribuição de energia das moléculas desse gás? Em outras palavras, quantas moléculas estarão em uma determinada faixa de energias? Qual a energia média das moléculas?

b) Nos sólidos cristalinos, os elétrons de condução só podem ocupar determinados níveis de energia. Como os elétrons se distribuem entre esses níveis?

Basta uma ligeira reflexão do leitor para verificar que perguntas como essas só podem ser respondidas estatisticamente. Existe um ramo da Física, chamado Mecânica estatística, que trata exclusivamente desses problemas. No restante deste capítulo vamos apresentar alguns resultados obtidos pela Mecânica estatística.

A primeira observação a fazer é que os resultados obtidos dependem das restrições impostas ao sistema em estudo. Por exemplo, para o gás perfeito, definido anteriormente, o número de estados permitidos é muito maior que o número de partículas presentes; assim, não há sentido em aplicarmos o Princípio de Exclusão de Pauli. Por outro lado, devemos aplicá-lo para calcularmos a distribuição de energia dos elétrons de condução em um sólido cristalino, já que nesse caso o número de elétrons é da mesma ordem de grandeza que o número de estados permitidos. Com essa idéia em mente, vamos estudar algumas distribuições importantes.

7.2. SISTEMAS DILUÍDOS – DISTRIBUIÇÃO DE BOLTZMANN

Sistemas diluídos podem ser definidos como aqueles em que o número de partículas é muito menor que o número de estados permissíveis. Um exemplo de sistema diluído é o gás perfeito. Vamos ver agora como as N partículas de um sistema diluído se distribuem entre os n estados permissíveis de energia.

Nosso cálculo será baseado nas seguintes hipóteses:

a) As partículas são *distintas*. O conceito de partículas distintas e idênticas é muito importante para a formulação estatística do problema. Quando dizemos que as partículas são distintas, isso significa que podemos localizar uma de-

terminada partícula e ter certeza de que se trata da partícula A e não de B, C ou outra partícula qualquer. Suponhamos, por exemplo, que o sistema consiste de apenas três partículas, A, B e C. Se essas partículas são distintas, então existem três grupamentos distintos de duas partículas, ou seja AB, AC e BC. Grupamentos como AB e BA são considerados idênticos, porque contêm as mesmas partículas. Por outro lado, se as partículas fossem idênticas, não poderíamos distinguir o grupamento AB do grupamento AC, por exemplo. A Fig. 7.1 ilustra essa diferença(*).

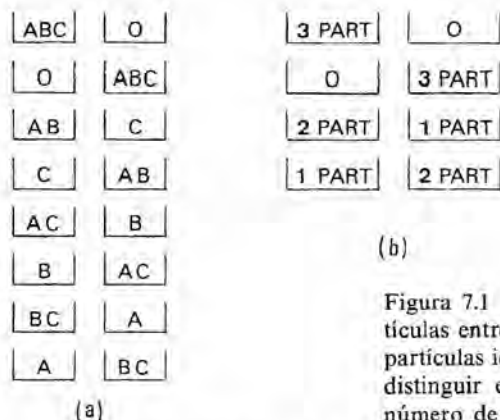



Figura 7.1 Diferentes modos de distribuir três partículas entre dois estados. (a) partículas distintas. (b) partículas idênticas. No caso (b), como não podemos distinguir entre as partículas, indicamos apenas o número de partículas em cada estado

b) O número total de partículas é conservado. Essa hipótese não se aplicaria, por exemplo, a um sistema contendo partículas instáveis.

c) A energia total do sistema é conservada. Isso equivale a supormos que o sistema está livre de influências externas.

Vamos agora distribuir as N partículas do sistema entre os n estados permitidos, de tal forma que N_1 partículas sejam alojadas no estado 1, N_2 no estado 2 e assim por diante (Fig. 7.2).

$$N_1 + N_2 + \ldots + N_i + \ldots + N_n = N = \text{Número total de partículas.}$$

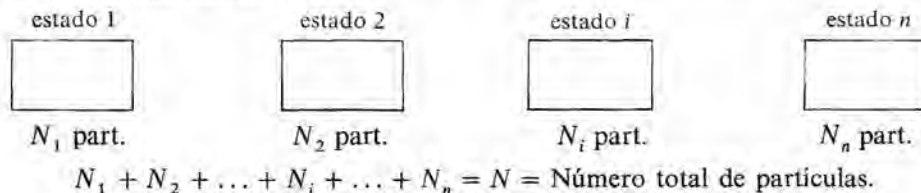



Figura 7.2 Distribuição de N partículas entre os estados $1, 2, \ldots, n$

Vejamos inicialmente de quantos modos é possível alojar as partículas da forma indicada na Fig. 7.2. O número de modos de colocar N_1 partículas no primeiro estado é $C_N^{N_1}$(**). Após colocarmos as N_1 partículas no estado 1, restam $N - N_1$ partículas; existem $C_{N-N_1}^{N_2}$ modos possíveis de colocar essas $N - N_1$ par-

(*) O leitor deve observar que estamos permitindo que mais de uma partícula ocupe o mesmo estado, isto é, estamos ignorando o Princípio de Exclusão de Pauli

(**) $C_N^{N_1}$ representa combinação de N elementos N_1 a N_1

tículas no estado 2. Do mesmo modo, existem $C^{N_3}_{N-N_1-N_2}$ modos possíveis de colocar as partículas restantes no estado 3, e assim por diante.

O número total de modos possíveis de se colocar N_1 partículas no estado 1, N_2 no estado 2, etc., é dado por

$$W = C^{N_1}_{N} \times C^{N_2}_{N-N_1} \times C^{N_3}_{N-N_1-N_2} \times \cdots \times C^{N_n}_{N-N_1-N_2-\cdots-N_{n-1}} =$$

$$= \frac{N!}{N_1!(N-N_1)!} \times \frac{(N-N_1)!}{N_2!(N-N_1-N_2)!} \times \frac{(N-N_1-N_2)!}{N_3!(N-N_1-N_2-N_3)!} \times$$

$$\times \ldots \frac{(N-N_1-N_2 \ldots - N_{n-1})!}{N_n!(N-N_1-N_2 \ldots - N_n)!} = \frac{N!}{N_1!N_2!N_3!\ldots N_n!}. \qquad \text{(Eq. 7.1)}$$

Vamos introduzir agora duas hipóteses adicionais que podem ser deduzidas rigorosamente no contexto da termodinâmica, mas que são suficientemente intuitivas para serem aceitas sem demonstração:

d) Quando o sistema está em equilíbrio, a distribuição de partículas entre os diferentes estados é a mais *provável*.

e) A distribuição mais provável de partículas é a que pode ser obtida maior número de vezes, isto é, é a que maximiza o valor de W na Eq. 7.1.

Estamos agora de posse de todas as informações necessárias para chegarmos à chamada distribuição de Boltzmann. Essa distribuição também é chamada de distribuição clássica, pois ignora o Princípio de Exclusão de Pauli.

Vamos recordar as hipóteses que conduzem à distribuição de Boltzmann:

a) as partículas são distintas;
b) o número total de partículas é conservado;
c) a energia total é conservada;
d) em equilíbrio, a distribuição de partículas é a mais provável;
e) a distribuição mais provável é a que maximiza W.

Nosso problema é portanto maximizar a função W (Eq. 7.1) usando como condições adicionais

$$N_1 + N_2 + N_3 \ldots + \ldots + N_n = \Sigma N_i = \text{Número total de partículas} = \text{Constante}; \qquad \text{(Eq. 7.2)}$$

$$N_1 E_1 + N_2 E_2 + N_3 E_3 + \ldots = \Sigma N_i E_i = \text{Energia total} = \text{Constante}, \qquad \text{(Eq. 7.3)}$$

onde E_i é a energia do estado i.

Um artifício bastante conveniente para facilitar o desenvolvimento matemático é maximizar lnW(*) em lugar de W, o que evidentemente não altera a solução do problema.

A condição necessária para que lnW seja máximo é

$$dlnW = \sum_i \frac{\partial lnW}{\partial N_i} dN_i = 0. \qquad \text{(Eq. 7.4)}$$

Além disso de acordo com as Eqs. 7.2 e 7.3, devemos ter

$$\sum_i N_i = \text{constante} \quad \therefore \quad \sum_i dN_i = 0; \qquad \text{(Eq. 7.5)}$$

$$\sum_i N_i E_i = \text{constante} \quad \therefore \quad \sum_i E_i dN_i = 0. \qquad \text{(Eq. 7.6)}$$

(*) lnW = Logaritmo neperiano de W

Neste ponto temos que fazer alguns comentários sobre o problema matemático que enfrentamos. Suponhamos que queremos maximizar uma função $f(x, y, z)$.

Ora, sabemos que

$$df = \frac{\partial f}{\partial x} dx + \frac{\partial f}{\partial y} dy + \frac{\partial f}{\partial z} dz.$$

Se os incrementos dx, dy e dz são *independentes*, a condição necessária para que f seja máxima é

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{\partial f}{\partial y} = \frac{\partial f}{\partial z} = 0.$$

No nosso caso, queremos maximizar lnW, mas os incrementos dN_i não são independentes, pois devem satisfazer às Eqs. 7.6 e 7.7. É óbvio portanto que não podemos anular diretamente as derivadas de lnW em relação às variáveis N_i, como fizemos para encontrar o máximo da função $f(x, y, z)$.

Torna-se então necessário utilizar um artifício, os chamados *coeficientes indeterminados de Lagrange*. A idéia é transformar o problema para o caso mais simples em que os incrementos são independentes entre si.

Vamos multiplicar as Eqs. 7.5 e 7.6 por α e β, respectivamente, e somar o resultado à Eq. 7.5. Fazendo isso, obtemos

$$\sum_i \left[\frac{\partial lnW}{\partial N_i} + \alpha + \beta E_i \right] dN_i = 0. \qquad \text{(Eq. 7.7)}$$

Ora, podemos sempre escolher dois dos incrementos, dN_1 e dN_2, por exemplo, de tal forma que as Eqs. 7.5 e 7.6 sejam satisfeitas, qualquer que seja o valor dos outros incrementos. Em seguida, escolhemos os coeficientes α e β de forma que os coeficientes de dN_1 e dN_2 na Eq. 7.7 se anulem, isto é, fazemos

$$\frac{\partial lnW}{\partial N_1} + \alpha + \beta E_1 = 0,$$

$$\frac{\partial lnW}{\partial N_2} + \alpha + \beta E_2 = 0.$$

Ora, nesse caso, a Eq. 7.7 se reduz a

$$\sum_{i \neq 1,2} \left[\frac{\partial lnW}{\partial N_i} + \alpha + \beta E_i \right] dN_i = 0, \qquad \text{(Eq. 7.8)}$$

em que os incrementos $dN_3, dN_4, \ldots$ são todos independentes. Em conseqüência, podemos igualar separadamente a zero cada uma das parcelas do somatório, obtendo(*)

$$\frac{\partial lnW}{\partial N_i} + \alpha + \beta E_i = 0. \qquad \text{(Eq. 7.9)}$$

Mas de acordo com a Eq. 7.1,

$$\frac{\partial lnW}{\partial N_i} = \frac{\partial}{\partial N_i} [lnN! - \sum_i lnN_i!] = -\frac{\partial}{\partial N_i} \sum_i lnN_i! = -\frac{\partial}{\partial N_i} lnN_i! \qquad \text{(Eq. 7.10)}$$

(*) Estritamente falando, a Eq. 7.9 só é válida para $i = 3, 4, 5, \ldots$; entretanto assim como escolhemos os incrementos dN_1 e dN_2, poderíamos ter escolhido qualquer outro par de incrementos; assim a equação pode ser aplicada, qualquer que seja o valor de i

Para qualquer sistema de dimensões práticas, N_i é um número extremamente grande; em conseqüência, podemos usar a aproximação de Stirling para a função fatorial:

$$lnN_i! = N_i(lnN_i - 1). \quad \text{(Eq. 7.11)}$$

Então

$$\frac{\partial lnW}{\partial N_i} = lnN_i. \quad \text{(Eq. 7.12)}$$

De acordo com as Eqs. 7.9 e 7.12, temos

$$lnN_i = \alpha + \beta E_i;$$
$$N_i = e^{\alpha + \beta E_i} = e^{\alpha} e^{\beta E_i}.$$

Fazendo $e^{\alpha} = A$, temos finalmente

$$N_i = Ae^{\beta E_i}, \quad \text{(Eq. 7.13)}$$

que é a chamada distribuição de Boltzmann. Repare que na distribuição de Boltzmann o número de partículas N_i com energia E_i depende exponencialmente da energia E_i do estado considerado.

Em geral, a Eq. 7.13 é escrita sem o índice i, isto é, na forma

$$N = Ae^{\beta E}. \quad \text{(Eq. 7.14)}$$

Uma dedução puramente matemática, como a apresentada anteriormente, não permite calcular o valor de β, que deve ser obtido através de considerações físicas. É possível provar, entretanto, utilizando conceitos da termodinâmica, que $\beta = -1/kT$, onde k é a constante de Boltzmann e T a temperatura absoluta.

Vamos agora aplicar a Eq. 7.14 a um problema específico; o cálculo da distribuição de energia *potencial* das moléculas de um gás perfeito.

Chamando de z a cota do ponto onde está localizada a molécula, sua energia potencial é dada por

$$E = mgz, \quad \text{(Eq. 7.15)}$$

onde m é a massa da molécula e g a aceleração da gravidade.

De acordo com a Eq. 7.14, o número de moléculas com cota z (e conseqüentemente com energia mgz) é dada por

$$N_z = Ae^{-mgz/kT}. \quad \text{(Eq. 7.16)}$$

A Eq. 7.16 está representada graficamente na Fig. 7.3.

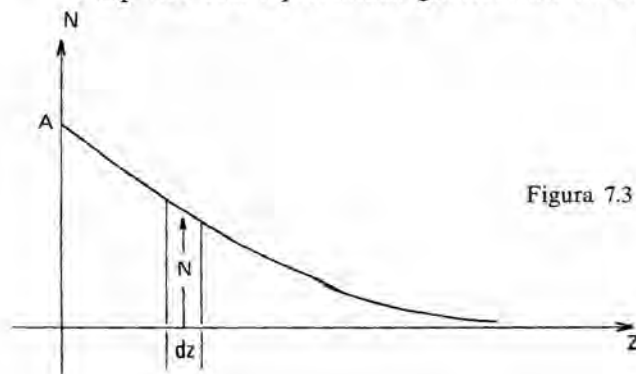



Figura 7.3 Distribuição de Boltzmann

Vamos calcular o valor da constante A. Chamando de N_T o número total de molécula do gás, temos

$$N_T = \int_{z=0}^{z=\infty} N_z dz = \int_{z=0}^{z=\infty} Ae^{-mgz/kT} = A\frac{kT}{mg}$$

e portanto

$$A = \frac{N_T mg}{kT}. \qquad \text{(Eq. 7.17)}$$

De acordo com as Eqs. 7.16 e 7.17, a distribuição de energia potencial das moléculas de um gás perfeito é dada por

$$N_z = \frac{N_T mg}{kT} e^{-mgz/kT}. \qquad \text{(Eq. 7.18)}$$

7.2. SISTEMAS CONCENTRADOS – DISTRIBUIÇÃO DE FERMI-DIRAC

No parágrafo anterior, estudamos o caso de sistemas diluídos de partículas distintas; consideremos agora o caso de um sistema constituído por partículas idênticas; além disso, suponhamos que o sistema é concentrado, isto é, que há necessidade de aplicar o Princípio de Exclusão de Pauli. A distribuição que resulta é a chamada distribuição de Fermi-Dirac(*).

As hipóteses que conduzem à distribuição de Fermi-Dirac são as seguintes:

a) as partículas são idênticas;
b) o número total de partículas é conservado;
c) a energia total é conservada;
d) o Princípio de Exclusão de Pauli é respeitado;
e) a distribuição mais provável é a que maximiza W.

Nosso primeiro problema é calcular o valor de W. Seja N_i o número de estados permitidos com energia E_i, e n_i o número de partículas distribuídas entre estes N_i estados (Fig. 7.4).

$$\begin{aligned} E_1 &\begin{cases} N_1 \text{ estados} \\ n_1 \text{ partículas} \end{cases} \\ E_2 &\begin{cases} N_2 \text{ estados} \\ n_2 \text{ partículas} \end{cases} \\ &\vdots \\ E_i &\begin{cases} N_i \text{ estados} \\ n_i \text{ partículas} \end{cases} \\ &\vdots \end{aligned}$$

Figura 7.4 Distribuição das n_i partículas entre os estados permissíveis

(*) Como a distribuição de Fermi-Dirac leva em conta o Princípio de Exclusão de Pauli, que não tem análogo algum na Mecânica Clássica, também é chamada de *distribuição quântica*

Consideremos o grupo E_i; como em cada um dos estados N_i só pode haver uma das partículas n_i(*), o número total de modos de colocar as n_i partículas nos N_i estados é dado por

$$W = C_{N_i}^{n_i} = \frac{N_i!}{n_i!(N_i - n_i)!} \cdot \qquad \text{(Eq. 7.19)}$$

O problema agora é maximizar a função W usando como condições adicionais:

$$\Sigma n_i = \text{constante}; \qquad \text{(Eq. 7.20)}$$

$$\Sigma n_i E_i = \text{constante}. \qquad \text{(Eq. 7.21)}$$

Deixamos a cargo do leitor o desenvolvimento completo usando os coeficientes de Lagrange (Problema 7.1). O resultado é o seguinte:

$$n_i = \frac{N_i}{1 + e^{\alpha - \beta E_i}} \cdot \qquad \text{(Eq. 7.22)}$$

Fazendo $f = \frac{n_i}{N_i}$, vemos que f corresponde à probabilidade de encontrarmos n_i partículas com energia E_i (para a qual existem N_i estados).

De acordo com a Eq. 7.22, temos

$$f = \frac{n_i}{N_i} = \frac{1}{1 + e^{\alpha - \beta E_i}} \cdot$$

Novamente é possivel mostrar que $\beta = -\frac{1}{kT}$, obtendo-se então

$$f = \frac{1}{1 + e^{\alpha + E_i/kT}} \cdot$$

Definimos uma nova variável E_F tal que

$$\alpha = -\frac{E_F}{kT} \cdot$$

Nesse caso, temos

$$f = \frac{1}{1 + e^{(E_i - E_F)/kT}},$$

ou eliminando o índice i:

$$f = \frac{1}{1 + e^{(E - E_F)/kT}} \cdot \qquad \text{(Eq. 7.23)}$$

A Fig. 7.5 mostra o gráfico de f em função da energia para várias temperaturas.

Repare que para $T = 0$ todos os estados com $E < E_F$ estão ocupados ($f = 1$) e todos os estados com $E > E_F$ estão vazios ($f = 0$). Repare ainda que

(*) Isso é uma conseqüência do Princípio de Exclusão de Pauli

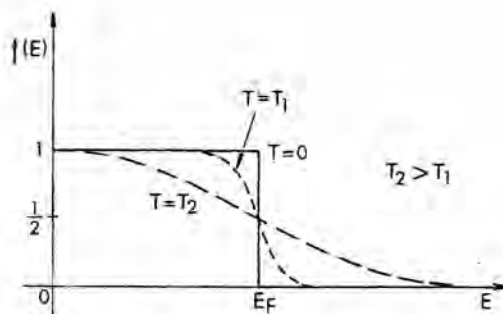



Figura 7.5 Distribuição de Fermi-Dirac

em qualquer temperatura, $f = 1/2$ para $E = E_F$, isto é, que a probabilidade de ocupação do nível E_F é sempre igual a 1/2.

A energia E_F é chamada de *nível de Fermi*.

É fácil demonstrar (Prob. 7.2) que para sistemas diluídos, isto é, quando $n_i \ll N_i$, a distribuição de Fermi-Dirac se reduz à distribuição de Boltzmann.

7.3. OUTRAS DISTRIBUIÇÕES

A distribuição de Boltzmann e a distribuição de Fermi-Dirac não são as únicas distribuições possíveis. Dependendo das hipóteses iniciais, outras distribuições podem ser obtidas. Por exemplo: se supusermos que as partículas são idênticas, mas não obedecem ao Princípio de Exclusão de Pauli (como é o caso dos fótons) chegaremos à chamada distribuição de Bose-Einstein. O leitor interessado em maiores pormenores deve consultar um livro de Mecânica Estatística (Kittel, 1958).

EXERCÍCIOS

7.1. Demonstre a Eq. 7.22.

7.2. Mostre que para sistemas diluídos a distribuição de Fermi-Dirac se reduz à distribuição de Boltzmann.

(*)7.3. Determine a distribuição de energia cinética das moléculas de um gás perfeito (distribuição de Maxwell). Para calcular a constante multiplicativa, suponha que o gás contém N moléculas.

7.4. Neste exercício vamos mostrar com um exemplo particular que a constante β da Eq. 7.14 é igual a $-1/kT$. Considere um gás perfeito em um recipiente a uma temperatura T, sob a ação da gravidade. Definindo:

$n(z)$ – número de moléculas com cota z por unidade de volume,
m – massa de cada molécula;
g – aceleração da gravidade;
ρ – massa específica do gás;
k – constante de Boltzmann;
T – temperatura absoluta.

a) Prove, sem usar a distribuição de Boltzmann, que

$$n(z) = Ae^{-mgz/kT}$$

onde A é uma constante.

b) Compare essa expressão com a Eq. 7.14 e verifique que

$$\beta = -\frac{1}{kT}$$

REFERÊNCIA

KITTEL, C., *Elementary Statistical Mechanics* (New York: John Wiley, 1958).

BIBLIOGRAFIA

Blakemore, J. S., *Semiconductor Statistics* (New York: Pergamon Press, 1962).
Mayer, J. E. e M. G. Mayer, *Statistical Mechanics* (New York: John Wiley, 1950).

8 Aplicação da distribuição de Fermi-Dirac a um material semicondutor

8.1. APROXIMAÇÕES PARA A FUNÇÃO DE DISTRIBUIÇÃO DE FERMI-DIRAC

A distribuição de energia dos elétrons em um sólido é governada pelas leis de estatística de Fermi-Dirac, já examinadas no capítulo anterior. O principal resultado dessa estatística é a *função de distribuição de Fermi-Dirac*, que nos dá a probabilidade de que um estado eletrônico com energia E esteja ocupado por um elétron:

$$f(E) = \frac{1}{1 + e^{(E - E_F)/kT}} \cdot \qquad \text{(Eq. 8.1)}$$

Essa função contém um parâmetro, E_F, que é chamado de *nível de Fermi*. Uma definição rigorosa do nível de Fermi o descreve como o potencial químico dos elétrons em um sólido. Para nossos propósitos, entretanto, é suficiente observar que o nível de Fermi é a energia para a qual a probabilidade de ocupação desse nível de energia é exatamente $1/2 (f = 1/2$ se $E = E_F)$.

A função de distribuição de Fermi-Dirac está representada na Fig. 8.1(a) para o caso de um semicondutor intrínseco. Na faixa de condução existe um grande número de estados disponíveis. Entretanto a probabilidade de ocupação desses estados é pequena; assim, haverá um número relativamente pequeno de elétrons na faixa de condução. A faixa de valência também tem um grande número de estados disponíveis. Quase todos esses estados estão ocupados por elétrons, já que a probabilidade de ocupação desses estados é grande; assim, haverá um número relativamente pequeno de estados desocupados, isto é, de buracos, na faixa de valência.

A função de distribuição de Fermi-Dirac é simétrica com relação ao nível de Fermi E_F. Assim se o número de estados disponíveis nas faixas de condução e de valência é o mesmo e se o número de elétrons na faixa de condução é igual ao número de buracos na faixa de valência (o que sabemos ser verdade no caso

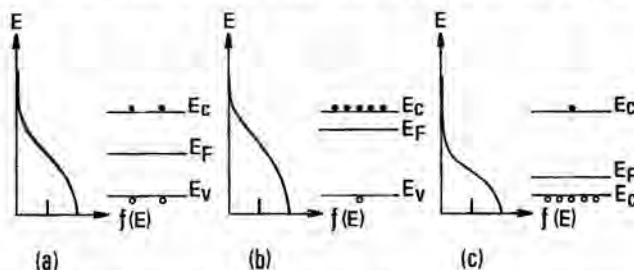



Figura 8.1 Aplicação da distribuição de Fermi-Dirac a semicondutores: intrínseco (a), tipo N (b) e tipo P (c)

de um semicondutor intrínseco), o nível de Fermi estará no centro da faixa proibida. O nível de Fermi de um semicondutor intrínseco é chamado de *nível de Fermi intrínseco* e designado pelo símbolo E_i.

Em um semicondutor tipo N, o número de elétrons na faixa de condução é maior que no caso intrínseco. Como, entretanto, a densidade de estados disponíveis de energia é o mesmo que no caso intrínseco, conclui-se que, em um semicondutor tipo N, o nível de Fermi, e com ele toda a função de distribuição de Fermi-Dirac, será deslocado para cima, para mais perto da faixa de condução. Ao contrário, em um semicondutor tipo P o nível de Fermi e a função de distribuição de Fermi-Dirac se deslocam para baixo. Os dois casos estão ilustrados nas Figs. 8.1(b) e 8.1(c).

Para energias muito acima ou muito abaixo do nível de Fermi, a distribuição de Fermi-Dirac pode ser aproximada pelas seguintes expressões:

$$f(E) \cong e^{-(E-E_F)/kT} \qquad (\text{para } |E-E_F| \gg kT,\ E > E_F), \qquad \text{(Eq. 8.2)}$$

$$f(E) \cong 1 - e^{-(E_F-E)/kT} \qquad (\text{para } |E-E_F| \gg kT,\ E < E_F). \qquad \text{(Eq. 8.3)}$$

O segundo termo do segundo membro da Eq. 8.3 pode ser considerado como a probabilidade de ocupação de um nível de energia E por um *buraco*.

8.2. CONCENTRAÇÃO DE PORTADORES EM UM CRISTAL

Normalmente, a concentração de impurezas em um semicondutor tipo N ou tipo P não é suficiente para que o nível de Fermi se aproxime muito da faixa de condução ou de valência. Nesse caso as aproximações anteriores são válidas e é fácil calcular a concentração dos portadores em função do nível de Fermi.

8.2.1. Determinação das concentrações de elétrons e buracos em função do nível de Fermi

A probabilidade de que um estado da faixa de condução esteja ocupado, no caso em que $E - E_F \gg kT$, é dada por

$$f_c(E) \cong e^{-(E-E_F)/kT}. \qquad \text{(Eq. 8.4)}$$

Por outro lado, a *densidade de estados por unidade de volume* na faixa de condução é dada pela Eq. 3.35

$$D_c(E) = \frac{1}{2\pi^2}\left(\frac{2m_e}{\hbar^2}\right)^{3/2}[E - E_G]^{1/2}, \qquad \text{(Eq. 8.5)}$$

onde tomamos como referência de energia o topo da faixa de valência (Fig. 8.2).

Repare que a Eq. 3.35 foi deduzida para o Gás de Fermi. O que fizemos foi supor que o efeito do cristal sobre os portadores pode ser descrito por uma *massa efetiva*, m_e, usada em lugar da massa "real", m (veja o parágrafo 6.6).

Ora, conhecendo a probabilidade de ocupação dos estados da faixa de condução, $f(E)$, e a densidade de estados disponíveis nessa mesma faixa, $D(E)$, podemos calcular a concentração de portadores, n, através da equação:

$$n = \int_{E_G}^{\infty} D(E)\,f(E)\,dE. \qquad \text{(Eq. 8.6)}$$

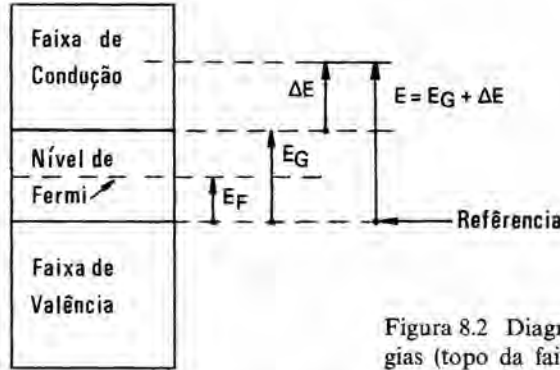



Figura 8.2 Diagrama ilustrando a referência de energias (topo da faixa de valência)

Substituindo as Eqs. 8.4 e 8.5 em 8.6, obtemos

$$n = \frac{1}{2\pi^2}\left(\frac{2m_e}{\hbar^2}\right)^{1/2} e^{E_F/kT}\int_{E_G}^{\infty}[E-E_G]^{1/2}e^{-E/kT}dE. \qquad \text{(Eq. 8.7)}$$

Fazendo $E - E_G = x$, temos

$$n = \frac{1}{2\pi^2}\left(\frac{2m_e}{\hbar^2}\right)^{3/2} e^{(E_F-E_G)/kT}\int_{0}^{\infty}x^{1/2}e^{-x/kT}dx. \qquad \text{(Eq. 8.8)}$$

A integral anterior pode ser encontrada em qualquer tabela de integrais. O resultado é

$$\int_0^{\infty} x^{1/2}e^{-x/kT}dx = \frac{kT}{2}\sqrt{\pi kT}. \qquad \text{(Eq. 8.9)}$$

Substituindo a Eq. 8.9 em 8.8 e lembrando que $\hbar = h/2\pi$, obtemos

$$n = 2\left(\frac{2\pi m_e kT}{h^2}\right)^{3/2} e^{(E_F-E_G)/kT} \qquad \text{(Eq. 8.10)}$$

A Eq. 8.10 pode ser usada para calcular a concentração de elétrons a partir dos parâmetros do material considerado. A Eq. 8.10 em geral é escrita na forma

$$n = N_c e^{(E_F-E_G)/kT}, \qquad \text{(Eq. 8.11)}$$

onde

$$N_c = 2\left(\frac{2\pi m_e kT}{h^2}\right)^{3/2} \qquad \text{(Eq. 8.12)}$$

é uma constante chamada de *densidade efetiva de estados na faixa de condução*.

Para calcular a concentração de buracos, basta observar que a probabilidade de ocupação dos níveis da faixa de valência por buracos é dada pelo segundo termo da Eq. 8.3, que pode ser escrito na forma:

$$f_v(E) = e^{(E-E_F)/kT} \quad (\text{para } |E-E_F| \gg kT) \qquad \text{(Eq. 8.13)}$$

e que a densidade de estados por unidade de volume na faixa de valência é dada por

$$D_v(E) = \frac{1}{2\pi^2}\left(\frac{2m_h}{\hbar^2}\right)^{3/2}(-E)^{1/2}, \qquad \text{(Eq. 8.14)}$$

onde m_h é a massa efetiva dos buracos.

Deixamos a cargo do leitor o restante da manipulação matemática para provar que

$$p = N_v e^{-E_F/kT}, \qquad \text{(Eq. 8.15)}$$

onde

$$N_v = 2\left(\frac{2\pi m_h kT}{h^2}\right)^{3/2} \qquad \text{(Eq. 8.16)}$$

é chamada de *densidade efetiva de estados na faixa de valência.*

Por outro lado, se tomarmos como referência um nível *arbitrário* de energia, localizado abaixo do topo da faixa de valência (Fig. 8.3), as Eqs. 8.11 e 8.15 poderão ser escritas na forma mais usual

$$n = N_c e^{(E_F - E_c)/kT}, \qquad \text{(Eq. 8.17)}$$

$$p = N_v e^{-(E_F - E_v)/kT}, \qquad \text{(Eq. 8.18)}$$

onde E_c e E_v são as energias correspondentes à base da faixa de condução e ao topo da faixa de valência, respectivamente. Repare que a escolha do nível de referência é totalmente arbitrária, já que as Eqs. 8.17 e 8.18 envolvem apenas *diferenças* entre os diversos níveis.

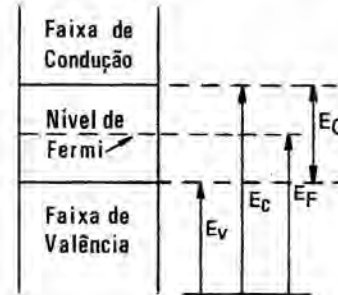



Figura 8.3 Referência arbitrária para a energia

8.2.2. Produto *np*

Multiplicando a Eq. 8.11 pela Eq. 8.15, obtemos

$$np = N_c N_v e^{-E_G/kT}. \qquad \text{(Eq. 8.19)}$$

A Eq. 8.19 mostra que em qualquer material semicondutor, *o produto da concentração de elétrons pela concentração de buracos não depende das impurezas presentes.*

8.2.3. Concentrações de portadores em um semicondutor intrínseco

Em um semicondutor intrínseco, a concentração de elétrons é igual à concentração de buracos, isto é

$$n = p = n_i, \qquad \text{(Eq. 8.20)}$$

onde n_i é chamada de *concentração intrínseca de portadores.*

Combinando a Eq. 8.20 com a Eq. 8.19, obtemos

$$n_i^2 = N_c N_v e^{-E_G/kT}, \quad \text{(Eq. 8.21)}$$

ou

$$n_i = \sqrt{N_c N_v}\, e^{-E_G/2kT}. \quad \text{(Eq. 8.22)}$$

A Eq. 8.22 permite calcular a concentração intrínseca de portadores, conhecidos os parâmetros do material e a temperatura em que este se encontra.

8.2.4. Taxa de geração térmica

Podemos também usar as Eqs. 8.10, 8.15 e 8.16 para calcular a taxa de geração térmica de um semicondutor em equilíbrio térmico. Com efeito, de acordo com a Eq. 6.2, temos

$$G(T) = \alpha np. \quad \text{(Eq. 8.23)}$$

Substituindo n e p por seus valores, temos

$$G(T) = AT^3 e^{-E_G/kT}, \quad \text{(Eq. 8.24)}$$

onde

$$A = 32\left(\frac{\pi k}{h^2}\right)^3 (m_h m_e)^{3/2} \quad \text{(Eq. 8.25)}$$

é uma constante independente da temperatura.

A Eq. 8.24 mostra que a variação da taxa de geração térmica com a temperatura é da forma $T^3 e^{-a/T}$. Essa dependência pode ser verificada experimentalmente.

8.2.5. Nível de Fermi de um semicondutor intrínseco

Como vimos, as seguintes expressões são válidas para qualquer semicondutor:

$$n = N_c e^{(E_F - E_c)/kT};$$
$$p = N_v e^{-(E_F - E_v)/kT}.$$

Para um semicondutor intrínseco, $n = p = n_i$. Assim chamando o nível de Fermi do semicondutor intrinseco de E_i, temos

$$N_c e^{(E_i - E_c)/kT} = N_v e^{-(E_i - E_v)/kT},$$

ou

$$E_i = \frac{E_c + E_v}{2} + \frac{kT}{2} \ln \frac{N_v}{N_c}. \quad \text{(Eq. 8.26)}$$

Ora, de acordo com as Eqs. 8.12 e 8.16, a única diferença entre N_c e N_v está no fato de que as massas efetivas dos elétrons e dos buracos não são iguais. Como em geral a diferença entre as duas massas não é grande, o nível de Fermi do material intrínseco está localizado aproximadamente no centro da faixa proibida. Com efeito, se tomarmos $N_c \simeq N_v$, $\ln(N_v/N_c) \simeq 0$ e portanto

$$E_i \simeq \frac{E_c + E_v}{2}. \quad \text{(Eq. 8.27)}$$

8.2.6. Concentrações de portadores em função de n_i e E_i

As concentrações de elétrons e buracos em um semicondutor tipo P ou tipo N também podem ser expressas em função da concentração intrínseca, n_i, e do nível de Fermi intrínseco, E_i. Com efeito, combinando as Eqs. 8.17, 8.18, 8.22 e 8.26, é fácil demonstrar que

$$n = n_i e^{(E_F - E_i)/kT}, \quad \text{(Eq. 8.28)}$$

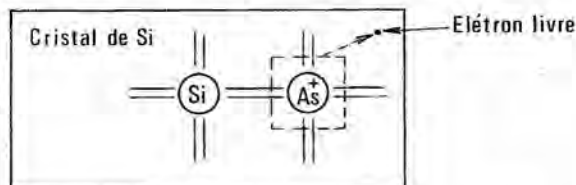
$$p = n_i e^{(E_i - E_F)/kT}. \quad \text{(Eq. 8.29)}$$

Naturalmente, quando $E_F = E_i$ nas equações anteriores, obtemos $n = p = n_i$, a concentração de portadores em um material intrínseco.

8.3. Neutralidade de carga elétrica nos semicondutores

Consideremos um bloco isolado de um semicondutor. É evidente que o bloco como um todo deve ser neutro, isto é, o número de cargas negativas no interior do bloco deve ser igual ao número de cargas positivas. Essa neutralidade global é chamada de *neutralidade macroscópica*.

A neutralidade macroscópica não impede que existam pequenas regiões no cristal em que a neutralidade local (a chamada *neutralidade microscópica*) não é respeitada. A Fig. 8.4 mostra um exemplo. Se considerarmos a pequena região em torno do átomo de arsênio, encontraremos um saldo de carga positiva. Entretanto, o elétron cedido à faixa de condução pelo átomo de arsênio não pode sair do cristal, de modo que o cristal como um todo continua neutro.

Figura 8.4 Neutralidade macroscópica. O cristal como um todo continua neutro

Vejamos agora as implicações da neutralidade macroscópica para o equilíbrio dos portadores em um semicondutor.

8.3.1. Semicondutores intrínsecos

No caso dos semicondutores intrínsecos, a condição de neutralidade pode ser expressa pela relação $n = p$, que é satisfeita automaticamente devido à natureza dos processos de geração e recombinação de portadores(*).

8.3.2. Semicondutores extrínsecos

No caso dos semicondutores extrínsecos (tipo N ou tipo P), a condição de neutralidade se torna mais complexa, pois além dos portadores, os átomos ionizados das impurezas também participam do equilíbrio de cargas.

Suponhamos um semicondutor que possui uma concentração N_A de impurezas aceitadoras e uma concentração N_D de impurezas doadoras. Essas impurezas

(*)Mais rigorosamente, deveríamos escrever $qn = qp$ para a condição de neutralidade, mas como as cargas dos portadores são iguais em valor absoluto, elas podem ser ignoradas

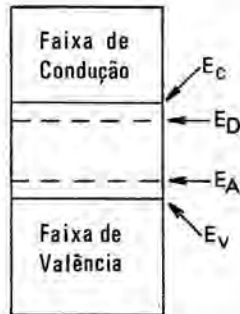



Figura 8.5 Diagrama ilustrando os níveis de energia E_V, E_C, E_A, E_D

introduzem, na faixa proibida, os níveis de energia E_A e E_D, respectivamente (Fig. 8.5).

No caso mais geral, nem todos os átomos doadores e aceitadores estarão ionizados. Vamos chamar de N_D^+ a concentração de átomos doadores ionizados(*) e de N_D^0 a concentração de átomos doadores neutros. Podemos imediatamente escrever

$$N_D^+ = N_D - N_D^0. \qquad \text{(Eq. 8.30)}$$

Do mesmo modo,

$$N_A^- = N_A - N_A^0, \qquad \text{(Eq. 8.31)}$$

onde N_A^- é a concentração de átomos aceitadores ionizados(**) e N_A^0 a concentração de átomos aceitadores neutros.

Nesse caso a condição de neutralidade macroscópica assume a seguinte forma:

$$n + N_A^- = p + N_D^+. \qquad \text{(Eq. 8.32)}$$

8.4. CONCENTRAÇÕES DE PORTADORES EM UM SEMICONDUTOR EXTRÍNSECO

As Eqs. 8.17 e 8.18 só permitem calcular as concentrações de portadores se conhecermos a posição do nível de Fermi, E_F, em relação ao topo da faixa de valência ou em relação à base da faixa de condução. No caso de um semicondutor intrínseco, como vimos, a posição do nível de Fermi pode ser calculada facilmente (Eq. 8.26), a partir da condição $n = p$.

No caso de um semicondutor extrínseco, em que $n \neq p$, a situação é mais complexa. Para determinarmos o nível de Fermi, temos que usar a equação de neutralidade (Eq. 8.32). Para isso, entretanto, é preciso exprimir N_A^- e N_D^+ em função do nível de Fermi. É o que veremos a seguir.

8.5. CÁLCULO DAS CONCENTRAÇÕES DE IMPUREZAS IONIZADAS EM FUNÇÃO DO NÍVEL DE FERMI

Vamos começar estudando o caso das impurezas aceitadoras. Podemos escrever

$$N_A^- = f_A N_A, \qquad \text{(Eq. 8.33)}$$

(*) O sinal positivo indica que os doadores ionizados são íons positivos

(**) O sinal negativo indica que os aceitadores ionizados são íons negativos

onde f_A é a probabilidade de que o estado de energia E_A introduzido pela impureza aceitadora na faixa proibida esteja ocupado (ou seja, a probabilidade de que o átomo da impureza esteja ionizado).

Ora, de acordo com a Eq. 8.1, a probabilidade de que um estado de energia E_A esteja ocupado por um elétron é dada por

$$f_A = \frac{1}{1 + e^{(E_A - E_F)/kT}}. \quad \text{(Eq. 8.34)}$$

De acordo com as Eqs. 8.33 e 8.34,

$$N_A^- = \frac{N_A}{1 + e^{(E_A - E_F)/kT}}, \quad \text{(Eq. 8.35)}$$

equação que permite calcular a concentração de átomos aceitadores ionizados em função do nível de Fermi.

No caso das impurezas doadoras, temos

$$N_D^0 = f_D N_D, \quad \text{(Eq. 8.36)}$$

onde f_D é a probabilidade de que o estado de energia E_D introduzido pela impureza doadora na faixa proibida esteja ocupado (ou seja, a probabilidade de que o átomo da impureza *não* esteja ionizado).

Nesse caso, portanto,

$$N_D^+ = (1 - f_D)N_D. \quad \text{(Eq. 8.37)}$$

O valor de f_D é dado por uma equação análoga à Eq. 8.34:

$$f_D = \frac{1}{1 + e^{(E_D - E_F)/kT}}. \quad \text{(Eq. 8.38)}$$

De acordo com as Eqs. 8.37 e 8.38,

$$N_D^+ = \frac{N_D}{1 + e^{(E_F - E_D)/kT}}, \quad \text{(Eq. 8.39)}$$

equação que permite calcular a concentração de átomos doadores ionizados em função do nível de Fermi.

Substituindo n, p, N_A^- e N_D^+ por seus valores na Eq. 8.32, obtemos

$$N_c e^{-(E_c - E_F)/kT} + \frac{N_A}{1 + e^{(E_A - E_F)/kT}} = N_v e^{-(E_F - E_v)/kT} + \frac{N_D}{1 + e^{(E_F - E_D)/kT}}. \quad \text{(Eq. 8.40)}$$

Teoricamente a Eq. 8.40 permite calcular o nível de Fermi a uma dada temperatura, se conhecemos os parâmetros N_c, N_v, N_A, N_D, E_c, E_A, E_v, E_D. Na prática, entretanto, a Eq. 8.40 não possui solução analítica, de modo que é preciso recorrer a métodos numéricos ou gráficos. Um método gráfico que mostra com clareza a influência dos diferentes parâmetros sobre a posição do nível de Fermi e a concentração dos portadores será examinado a seguir.

8.6. MÉTODO DE SCHOCKLEY PARA A DETERMINAÇÃO DAS CONCENTRAÇÕES DE PORTADORES EM UM SEMICONDUTOR INTRÍNSECO

Voltemos à Eq. 8.17, que exprime a concentração de elétrons em função do nível de Fermi:

$$n = N_c e^{(E_F - E_c)/kT}. \quad \text{(Eq. 8.41)}$$

Tomando os logaritmos de ambos os membros da Eq. 8.41, obtemos

$$\log_{10} n = \log_{10} N_c - \frac{E_c - E_F}{2{,}3kT}. \qquad \text{(Eq. 8.42)}$$

Assim, se traçarmos um gráfico de n em função de E_F, usando uma escala logaritmica para n e uma escala linear para E_F, obteremos uma linha reta (Fig. 8.6).

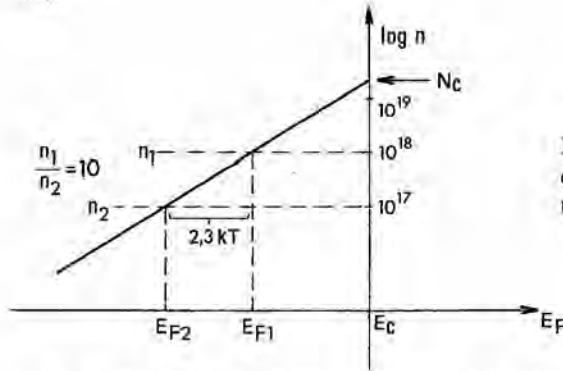



Figura 8.6 Variação do logaritmo da concentração de elétrons com o nivel de Fermi

A Eq. 8.42 mostra que uma variação de uma década na concentração de elétrons, n, corresponde a uma variação de $2{,}3kT$ no nível de Fermi, E_F.

Analogamente, a variação da concentração de buracos com o nível de Fermi pode ser expressa pela equação

$$\log_{10} p = \log_{10} N_v + \frac{E_v - E_F}{kT}. \qquad \text{(Eq. 8.43)}$$

A Eq. 8.43 está representada graficamente na Fig. 8.7.

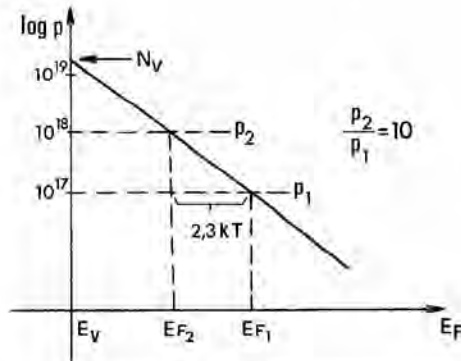



Figura 8.7 Variação do logaritmo da concentração de buracos com o nível de Fermi

Por outro lado a concentração de doadores ionizados em função do nivel de Fermi é dada pela Eq. 8.39:

$$N_D^+ = N_D \frac{1}{1 + e^{-(E_D - E_F)/kT}}. \qquad \text{(Eq. 8.44)}$$

Vamos analisar por partes a variação de N_D com E_F. Quando $E_F = E_D$, $N_D^+ = N_D/2$. Quando $E_F \ll E_D$, $(E_D - E_F)/kT \gg 0$ e portanto $N_D^+ \simeq N_D$. Por

outro lado, quando $E_F \gg E_D$, $e^{-(E_D-E_F)/kT} \gg 1$ e portanto

$$N_D^+ \simeq \frac{N_D}{e^{-(E_D-E_F)/kT}} = N_D e^{-(E_F-E_D)/kT}$$

$$\log_{10} N_D^+ = \log_{10} N_D + \frac{E_D - E_F}{kT}. \qquad \text{(Eq. 8.45)}$$

A Eq. 8.45 tem a mesma forma que a Eq. 8.43, o que mostra que quando $E_F \gg E_D$, N_D^+ varia com E_F da mesma forma que p.

Os casos extremos $E_F \ll E_D$ e $E_F \gg E_D$ nos dão as assintotas da curva que representa a variação de $\log_{10} N_D^+$ com E_F. Para obtermos alguns pontos intermediários, podemos usar a seguinte tabela, baseada na Eq. 8.44:

$E_D - E_F$	$-\frac{E_D - E_F}{kT}$	$e^{-(E_D-E_F)/kT}$	N_D^+.
1,1 kT	–1,1	0,33	$N_D/1{,}33 = 0{,}75\, N_D$
0,1 kT	–0,1	0,90	$N_D/1{,}90 = 0{,}53\, N_D$
0 kT	0	1	$N_D/2 = 0{,}50\, N_D$
–0,1 kT	+0,1	1,10	$N_D/2{,}1 = 0{,}48\, N_D$
–1,1 kT	+1,10	3,00	$N_D/4 = 0{,}25\, N_D$
–1,39 kT	+1,39	4,00	$N_D/5 = 0{,}2\, N_D$
–1,95 kT	+1,95	–7,00	$N_D/8 = 0{,}125\, N_D$
–2,3 kT	+2,30	–9,00	$N_D/10 = 0{,}1\, N_D$

Podemos agora traçar o gráfico da variação de $\log N_D^+$ com E_F. (Fig. 8.8).

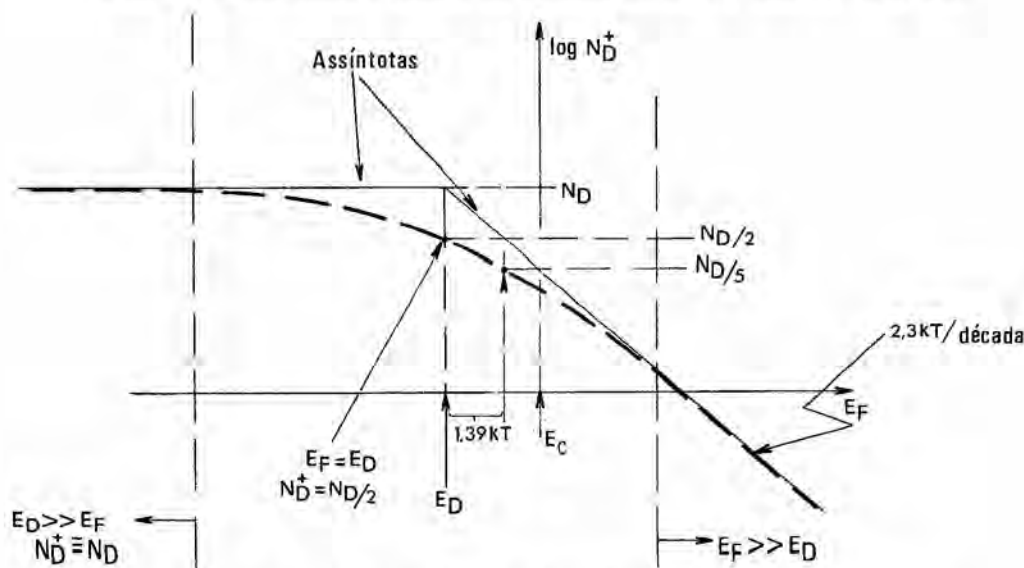



Figura 8.8 Variação de $\log N_D^+$ com E_F. Para $E_F \gg E_D$, essa variação é linear, com coeficiente angular de uma década de variação de N_D^+ para cada $2{,}3\, kT$ de variação de E_F

Na prática, três pontos na região intermediária são suficientes para se conseguir uma precisão razoável no traçado da curva.

A análise do comportamento de N_A^- em função de E_F é inteiramente análoga e fica a cargo do leitor (Prob. 8.9).

Agora que descrevemos a variação de n, p, N_D^+ e N_A^- com o nível de Fermi, vejamos em que consiste o método de Schockley. A idéia é traçar *em um mesmo gráfico* (Moll, 1964) as curvas de n, p, N_D^+ e N_A^- em função de E_F e resolver a equação $n + N_A^- = p + N_D^+$, procedendo da seguinte forma (Fig. 8.9):

1. Traçam-se as curvas de n, p, N_A^- e N_D^+;
2. Somam-se ponto a ponto os valores de n e N_A^-;
3. Somam-se ponto a ponto os valores de p e N_D^+;
4. Determina-se o ponto de interseção das curvas $\log(n + N_A^-)$ e $\log(p + N_D^+)$.

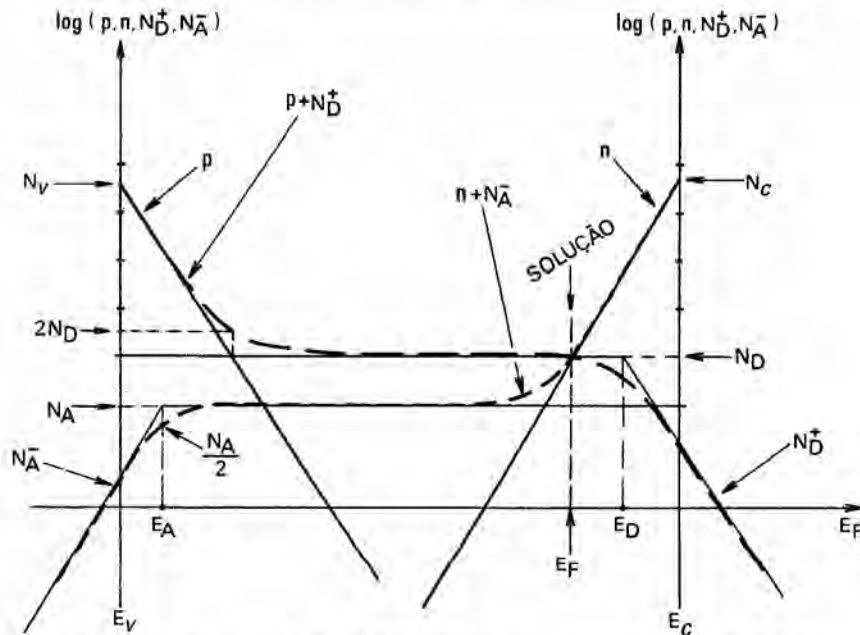



Figura 8.9 Ilustração do método de Schockley para a determinação de E_F. No ponto de interseção, $p + N_D^+ = n + N_A^-$

A abscissa do ponto de interseção é o valor de E_F que satisfaz à Eq. 8.40. Os valores de n, p, N_D^+ e N_A^- também podem ser obtidos diretamente do gráfico. Na prática, entretanto, é mais conveniente obter do gráfico apenas E_F (como se trata de uma escala linear, o erro não é muito grande) e calcular n e p através das equações

$$n = N_c e^{-(E_c - E_F)/kT}, \qquad \text{(Eq. 8.46)}$$

$$p = \frac{n_i^2}{n}, \qquad \text{(Eq. 8.47)}$$

ou então através das equações

$$p = N_v e^{-(E_F - E_v)/kT}, \qquad \text{(Eq. 8.48)}$$

$$n = \frac{n_i^2}{p}. \qquad \text{(Eq. 8.49)}$$

Do mesmo modo, é mais conveniente calcular N_D^+ e N_A^- através das equações

$$N_D^+ = N_D \frac{1}{1 + e^{-(E_D - E_F)/kT}} \qquad \text{(Eq. 8.50)}$$

$$N_A^- = N_A \frac{1}{1 + e^{-(E_A - E_F)/kT}} \qquad \text{(Eq. 8.51)}$$

Com referência à Fig. 8.8 convém notar o seguinte:

1) A escala das ordenadas é *logarítmica*. Assim para $E_F \simeq E_v$, $p + N_D^+ \simeq p$; para $E_F \simeq E_c$, $n + N_A^- \simeq n$. Na interseção da curva de p com a curva de N_D^+, $p + N_D^+ \simeq 2N_D^+$ (em escala logarítmica).
2) A inclinação das curvas de n e p e das assíntotas oblíquas de N_D^+ e N_A^- depende da temperatura.

EXERCÍCIOS

(*)8.1. Considere um semicondutor tipo N, em equilíbrio térmico, que contém uma concentração N_D de átomos doadores. Chamando de n_n e p_n as concentrações de portadores em maioria e minoria no material, respectivamente: a) calcule n_n e p_n, supondo que todas as impurezas estão ionizadas; b) a aproximação $p_n = n_i^2/N_D$ é muito usada na prática. Para um cristal de germânio com $N_D = 7{,}5 \times 10^{13}\ \text{cm}^{-3}$, calcule o erro cometido usando essa aproximação.

8.2. Calcule a localização do nível de Fermi intrínseco no silício a –78 °C, 27 °C e 300 °C. É razoável supor que o nível de Fermi está no centro da faixa proibida?

8.3. Desenhe (em escala) o diagrama de níveis de energia para o silício com 10^{16} átomos de boro por centímetro cúbico. Indique as faixas de condução e de valência, o nível de Fermi intrínseco e o nível de Fermi real.

8.4. O ouro no silício é uma impureza peculiar, pois pode comportar-se tanto como doador como aceitador. Em outras palavras, o ouro introduz dois níveis na faixa proibida, um a 0,35 eV da banda de valência e outro a 0,54 eV da banda de condução. Pergunta-se: a) Um cristal de silício com uma certa concentração N_X de ouro é tipo N ou tipo P?; b) Qual é a posição do nível de Fermi?

8.5. Quando discutimos o fenômeno da neutralidade macroscópica, consideramos apenas as impurezas mais simples. Existem impurezas, como o zinco no silício, que podem se comportar como um aceitador simples ou como um aceitador duplo, isto é, que podem capturar um ou dois elétrons. No caso de um cristal de silício com uma concentração N_A de átomos de zinco e N_D átomos de fósforo, escreva a equação de neutralidade macroscópica.

(*)8.6. O zinco introduz no silício os seguintes níveis na faixa proibida; E_1, 0,35 eV acima do topo da banda de valência; E_2, 0,2 eV acima de E_1. Para um cristal de silício com 2×10^{15} átomos/cm³ de As e $0{,}9 \times 10^{15}$ átomos/cm³ de Zn, calcule: a) a posição do nível de Fermi; b) a concentração de elétrons; c) a concentração de buracos.

8.7. a) Explique o fenômeno da compensação de impurezas, isto é, a diminuição do número de portadores e da condutividade de um cristal quando este contém simultaneamente impurezas tipo P e tipo N; b) Podemos verificar se um cristal é intrínseco simplesmente medindo a sua condutividade? Justifique.

8.8. Calcule n, p e E_F para um cristal de silício contendo $1{,}1 \times 10^{16}$ átomos/cm^3 de boro e 9×10^{15} átomos/cm^3 de fósforo a 27 °C.

8.9. Analise a variação da concentração de aceitadores ionizados com o nível de Fermi. Desenhe a curva de $\log_{10} N_A$ em função de E_F.

REFERÊNCIA

MOLL, J. L., *Physics of Semiconductors* (New York: McGraw-Hill, 1964), p. 86.

BIBLIOGRAFIA

Blatt, F. J., *Physics of Electronic Conduction in Solids* (New York: McGraw Hill, 1968), Cap. 8.

Grove, A. S., *Physics and Technology of Semiconductor Devices* (New York: John Wiley, 1967), Cap. 4.

9 Transporte de cargas nos semicondutores

Neste capítulo vamos estudar o movimento dos portadores de carga nos semicondutores e apresentar as leis que regem os dois processos básicos de transporte de cargas, que são a deriva(*) e a difusão.

9.1. ESTUDO DA DERIVA

9.1.1. O processo de deriva

Consideremos um semicondutor tipo *N* com uma concentração uniforme de doadores. Na ausência de campo elétrico externo, os elétrons do cristal estão em movimento térmico aleatório, interrompido por colisões (Fig. 9.1a).

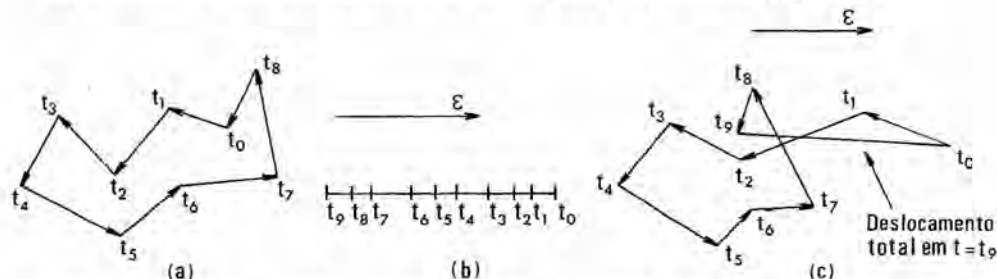



Figura 9.1 *Deriva* de portadores. (a) Movimento térmico dos portadores na ausência de campo elétrico externo. (b) Componente de *deriva*, produzida pelo campo externo. (c) Efeito combinado da *deriva* e da agitação térmica

É fácil demonstrar que o deslocamento total do elétron, depois de um grande número de colisões, é zero, pois não há uma direção preferencial para o movimento do elétron depois de cada colisão.

Se aplicarmos um campo elétrico ao cristal, o elétron será acelerado pelo campo elétrico entre cada duas colisões. Essa aceleração tem uma direção preferencial: a do campo elétrico aplicado. Assim, superposta à velocidade térmica, haverá uma pequena componente da velocidade devido ao efeito do campo elétrico [Fig. 9.1(b)]. Essa componente é chamada de velocidade de deriva; se somarmos os efeitos da velocidade térmica aos da velocidade de deriva, teremos o movimento real do elétron sob a ação do campo elétrico [Fig. 9.1(c)]. Para termos uma idéia de ordens de grandeza, a velocidade térmica dos elétrons no silício à temperatura de 27 °C é de 10^5 m/s, enquanto a velocidade de deriva sob o efeito de um campo elétrico de 10 V/cm é de 390 m/s, muito menor, portanto.

Como a velocidade de deriva está sempre superposta a uma velocidade térmica muito maior, não faz sentido acompanharmos o movimento de um

(*)Em inglês, *drift*

elétron em particular; o que devemos fazer é calcular o movimento médio de muitos elétrons em um momento específico de tempo.

Suponhamos que a probabilidade de que um elétron sofra uma colisão em um intervalo de tempo dt é dt/τ, onde τ é uma constante de tempo. Seja n_0 o número de elétrons que sofreram uma colisão no tempo t_0 e suponhamos que desses elétrons, n não sofreram colisões subseqüentes no intervalo de tempo $t - t_0$; então:

$$dn = -n\frac{dt}{\tau}, \qquad \text{(Eq. 9.1)}$$

$$n = n_0 e^{-(t-t_0)/\tau}. \qquad \text{(Eq. 9.2)}$$

De acordo com a Eq. 9.1, o número de elétrons que sofrem colisões entre t e $t + dt$ é igual a $n dt/\tau$. Para esses elétrons, o tempo entre colisões é $t - t_0$. Assim o tempo médio entre colisões(*) para os n_0 elétrons é dada por

$$<t - t_0> = \frac{1}{n_0}\int_{t_0}^{\infty}(t - t_0)n\frac{dt}{\tau} = \tau. \qquad \text{(Eq. 9.3)}$$

A velocidade média de deriva pode ser calculada de forma semelhante. A velocidade de um elétron que sofreu a última colisão em t_0 é dada por

$$v = v_0 - \frac{q\varepsilon(t - t_0)}{m^*}, \qquad \text{(Eq. 9.4)}$$

onde o primeiro termo representa a velocidade inicial depois da colisão e o segundo termo representa a velocidade causada pelo campo elétrico ε(**). O símbolo m^* representa a massa efetiva dos elétrons no cristal. A massa efetiva é uma grandeza que substitui a massa de um elétron livre (veja o Cap. 6) em vários cálculos. Ela reflete o efeito da rede do cristal sobre o comportamento do elétron.

Como a velocidade v_0 depois da colisão não tem uma direção preferencial, a média de v_0 para muitos elétrons é zero. Para calcularmos o valor médio de v no tempo t, entretanto, precisamos conhecer a distribuição de elétrons em função de t_0.

Seja w a porcentagem de elétrons que ainda não sofreram uma colisão no tempo t depois de sofrerem uma colisão em t_0. De acordo com a Eq. 9.2,

$$w = \frac{n}{n_0} = e^{-(t-t_0)/\tau}. \qquad \text{(Eq. 9.5)}$$

Assim o número de elétrons que sofreram uma colisão no intervalo de tempo entre t_0 e $t_0 + dt_0$ e ainda não sofreram outra colisão no tempo t é dado por

$$dn = n\frac{dt_0}{\tau} = \frac{n_0 w\, dt_0}{\tau} = n_0 e^{-(t-t_0)/\tau}\frac{dt_0}{\tau}. \qquad \text{(Eq. 9.6)}$$

(*)Estamos representando o valor médio de uma grandeza f pelo símbolo $<f>$

(**)Chamamos a atenção do leitor para a simbologia que estamos utilizando:

ϵ = permissividade,
ε = campo elétrico,
E = energia,
e = base dos logaritmos neperianos

Nesse caso, a velocidade média de deriva dos elétrons será:

$$<v> = -\frac{q\varepsilon}{n_0 m^*}\int_{-\infty}^{t} n_0 w(t-t_0)\frac{dt_0}{\tau} = -\frac{q\varepsilon}{m^*}\tau = -\mu\varepsilon. \qquad \text{(Eq. 9.7)}$$

A constante $\mu = q\tau/m^*$ é definida como a *mobilidade* dos elétrons e será estudada na Sec. 9.1.3.

Naturalmente, a velocidade média de deriva é independente do tempo. O sinal negativo da Eq. 9.7 indica que a velocidade de deriva dos elétrons tem o sentido contrário ao do campo elétrico ε.

De acordo com a Eq. 9.7, a densidade de corrente de deriva dos elétrons é dada por

$$J_n = -nq<v_n> = nq\,\mu_n\varepsilon^{(*)}. \qquad \text{(Eq. 9.8)}$$

No caso de buracos, a equação correspondente à Eq. 9.7 será

$$<v_p> = \mu_p\varepsilon, \qquad \text{(Eq. 9.9)}$$

onde o segundo membro é positivo, porque a velocidade de deriva dos buracos tem o mesmo sentido que o campo elétrico. Assim, a densidade de corrente de deriva dos buracos é dada por

$$J_p = pq<v_p> = pq\,\mu_p\varepsilon. \qquad \text{(Eq. 9.10)}$$

Quando a corrente de deriva consiste em elétrons e buracos, podemos combinar as Eqs. 9.8 e 9.10, obtendo

$$J_c = J_n + J_p = q(n\,\mu_n + p\,\mu_p)\varepsilon. \qquad \text{(Eq. 9.11)}$$

9.1.2. Resistividade de um semicondutor

Considere um bloco de um material qualquer de seção reta A e comprimento l, ao qual é aplicada uma tensão V, produzindo uma corrente I (Fig. 9.2).

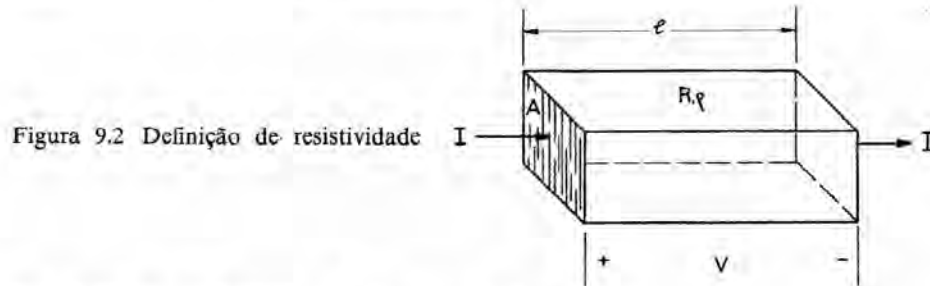



Figura 9.2 Definição de resistividade

Por definição, a densidade de corrente J é dada por

$$J = \frac{I}{A}.$$

(*) A equação $J = qnv$ é uma equação básica que relaciona a densidade de corrente (J), em qualquer material, à velocidade dos portadores de carga nesse material (v), à densidade de portadores (n) e à carga de cada portador (q)

Por outro lado chamando de ρ a resistividade do material, a resistência entre as duas seções transversais será

$$R = \rho \frac{l}{A}.$$

Assim, temos

$$I = \frac{V}{R} = \frac{V}{\rho l/A} = \frac{1}{\rho}\frac{A}{l}V,$$

ou

$$\frac{I}{A} = \frac{1}{\rho}\cdot\frac{V}{l},$$

porém, $I/A = J$ e $V/l = \varepsilon$, onde ε é o campo elétrico no interior do bloco. Conseqüentemente,

$$J = \frac{1}{\rho}\cdot\varepsilon = \sigma\varepsilon, \qquad \text{(Eq. 9.12)}$$

onde $\sigma = 1/\rho$ é a condutividade do material.

Comparando essa expressão com a Eq. 9.11, verificamos que em um semicondutor

$$\sigma = q(\mu_n n + \mu_p p), \qquad \text{(Eq. 9.13)}$$

$$\rho = \frac{1}{q(\mu_n n + \mu_p p)}. \qquad \text{(Eq. 9.14)}$$

De acordo com a Eq. 9.14, a resistividade dos semicondutores varia inversamente com a mobilidade e com a concentração de portadores. Assim, a uma dada temperatura, a resistividade depende apenas da concentração de impurezas (doadoras ou aceitadoras) do material. Na prática, a variação da resistividade com a concentração de impurezas só obedece a uma equação simples para baixas concentrações de impurezas, caso em que a mobilidade dos elétrons e buracos é praticamente constante; para concentrações elevadas, tanto a mobilidade como a concentração dos portadores dependem da concentração de impurezas (veja 9.1.3).

A Fig. 9.3 mostra a variação da resistividade do silício com a concentração de impurezas para cristais tipo P e tipo N. A mobilidade dos portadores se mantém constante até a concentração de impurezas atingir valores da ordem de 10^{16} átomos/cm^3.

9.1.3. Mobilidade dos portadores em um semicondutor

A mobilidade dos portadores de carga em um cristal depende das interações desses portadores com os átomos da rede cristalina, com os átomos de impurezas, com defeitos da rede, com outros portadores, etc. Todas essas interações são conhecidas pelo nome genérico de *mecanismos de espalhamento* (*scattering mechanisms*).

No caso dos semicondutores usados na prática, que estão relativamente livres de defeitos e cuja densidade de portadores não é muito grande, os me-

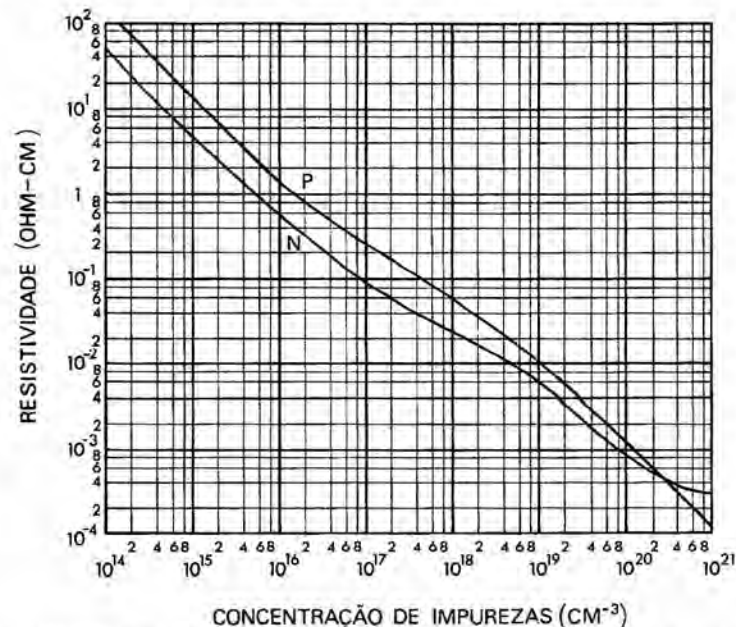



Figura 9.3 Resistividade do silício a 300 K em função da concentração de impurezas. [Irvin, J. C., "Resistivity of Bulk Silicon and of Diffused Layers in Silicon", *Bell Syst. Tech. J.* 41, 387 (1962). Reproduzido com a permissão da American Telephone and Telegraph Company.]

canismos de espalhamento mais importantes são o *espalhamento pela rede* (*lattice scattering*) e o *espalhamento por impurezas ionizadas* (*ionized impurity scattering*) (*Fan*, 1955).

O espalhamento pela rede resulta da interação entre os portadores e os átomos que constituem a rede cristalina. Como vimos no Cap. 6, os átomos da rede cristalina não estão imóveis, mas oscilam em relação à posição de equilíbrio. A amplitude dessas oscilações é diretamente proporcional à temperatura do cristal. É fácil ver portanto que o tempo médio entre colisões dos portadores com a rede, τ_R, deve ser inversamente proporcional à temperatura. Por analogia com a Eq. 9.7, podemos definir uma constante μ_R através da equação.

$$\mu_R = \frac{q\tau_R}{m^*}, \qquad \text{(Eq. 9.15)}$$

onde μ_R é a contribuição do espalhamento pela rede para a mobilidade total, τ_R é o tempo médio entre colisões com a rede e m^* é a massa efetiva do portador considerado.

Outro mecanismo importante de espalhamento, principalmente em baixas temperaturas, ou para grandes concentrações de impurezas, é o espalhamento por impurezas ionizadas. Esse tipo de espalhamento se deve ao fato de que tanto os portadores como os átomos ionizados das impurezas possuem cargas elétricas. Ao passar pelas proximidades de um átomo ionizado, o portador sofre um desvio em sua trajetória, devido à interação entre o campo elétrico

do átomo ionizado e a carga do portador. Naturalmente, quanto maior a velocidade do portador, menor a deflexão sofrida; assim, o espalhamento por impurezas ionizadas é mais importante em baixas temperaturas, que implicam em uma menor velocidade térmica dos portadores.

Como no caso do espalhamento pela rede, podemos associar ao espalhamento por impurezas ionizadas uma constante de tempo, τ_I, o tempo médio entre colisões dos portadores com os átomos das impurezas ionizadas. Podemos definir também uma constante, μ_I, através da equação:

$$\mu_I = \frac{q\tau_I}{m^*}, \qquad \text{(Eq. 9.16)}$$

onde μ_I é a contribuição do espalhamento por impurezas ionizadas para a mobilidade total. Naturalmente, τ_I e μ_I são inversamente proporcionais à concentração de impurezas ionizadas.

Os outros mecanismos de espalhamento só são importantes em circunstâncias especiais. O *espalhamento elétron-elétron*, o espalhamento *buraco-buraco* e o *espalhamento elétron-buraco*, caracterizados por diferentes tempos médios entre colisões, τ_{e-e}, τ_{h-h} e τ_{e-h}, resultam da interação direta de portadores e só são importantes quando a densidade de portadores é muito elevada. O *espalhamento por impurezas neutras* (*neutral impurity scattering*), caracterizado por um tempo entre colisões τ_N, resulta da interação de portadores com impurezas neutras e só é importante em temperaturas muito baixas, quando nem todos os átomos das impurezas estão ionizados.

Se supusermos que os mecanismos de espalhamento que ocorrem no material são independentes entre si (o que nem sempre é verdade), a mobilidade total dos portadores pode ser calculada a partir das mobilidades parciais através de uma equação bastante simples. Com efeito, basta observar que se $\tau_1, \tau_2, \tau_3, \ldots$ são os tempos médios entre colisões para os diversos mecanismos de espalhamento, então $1/\tau_1, 1/\tau_2, 1/\tau_3, \ldots$ representam os números médios de colisões por unidade de tempo para os referidos mecanismos. Assim, supondo que os mecanismos são independentes, o número médio total de colisões por unidade de tempo é dado por

$$1/\tau = 1/\tau_1 + 1/\tau_2 + 1/\tau_3 + \ldots \qquad \text{(Eq. 9.17)}$$

Ora, como por definição $\mu = q\tau/m^*$, $\mu_1 = q\tau_1/m^*$, $\mu_2 = q\tau_2/m^*, \ldots$, temos

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{\mu_1} + \frac{1}{\mu_2} + \frac{1}{\mu_3} + \ldots \qquad \text{(Eq. 9.18)}$$

onde μ é a mobilidade total e $\mu_1, \mu_2, \mu_3, \ldots$ são as contribuições para a mobilidade total dos diversos mecanismos de espalhamento.

Quando os mecanismos de espalhamento considerados são apenas o espalhamento pela rede e o espalhamento por impurezas ionizadas, a Eq. 9.18 se reduz a uma expressão muito usada na prática

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{\mu_R} + \frac{1}{\mu_I}. \qquad \text{(Eq. 9.19)}$$

A mobilidade que aparece na tabela de constantes no início deste livro é a mobilidade do material intrínseco à temperatura ambiente e corresponde

praticamente à mobilidade resultante do espalhamento pela rede. Entretanto, esse valor também é usado na prática para materiais tipo P e tipo N, desde que a concentração de impurezas não seja muito grande.

Finalmente, completando nosso estudo da mobilidade, vamos discutir a influência do campo elétrico sobre a mobilidade dos portadores.

Voltemos à equação básica que relaciona a velocidade de deriva dos portadores, v, ao campo elétrico aplicado, ε:

$$v = \mu\varepsilon. \qquad \text{(Eq. 9.20)}$$

Se μ não dependesse do campo elétrico, o gráfico de v em função de ε seria uma linha reta de coeficiente angular igual a μ.

A Fig. 9.4 mostra o que acontece na prática à medida que o campo elétrico aumenta.

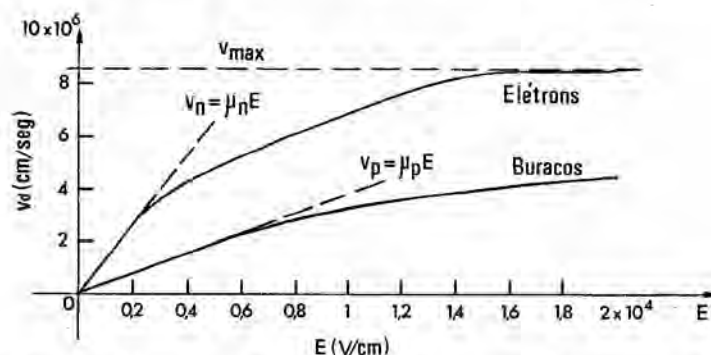



Figura 9.4 Variação da velocidade de *deriva* com o campo elétrico no silício (Ryder, 1953)

Para campos elétricos fracos, a velocidade aumenta linearmente com o campo; para campos elétricos intensos, a velocidade dos portadores passa a aumentar mais lentamente, tendendo para um valor constante. Esse fenômeno, que é chamado de *efeito dos elétrons quentes*, se deve ao fato de que os portadores não se mantêm em equilíbrio térmico com a rede cristalina quando sua energia cinética é muito grande (Ryder, 1953).

9.2. ESTUDO DA DIFUSÃO

9.2.1. O processo de difusão

Ao calcularmos a densidade de corrente de deriva, Eq. 9.11, não levamos em conta a variação espacial das concentrações de portadores, n e p. Se n e p variarem ao longo do cristal, haverá uma outra contribuição para a corrente que será somada à corrente de deriva.

Consideremos o movimento térmico de partículas no espaço unidimensional da Fig. 9.5, onde v_t é a velocidade térmica das partículas e l é o caminho livre médio, definido por $l = v_t\tau$. (τ = tempo médio entre colisões).

O número de partículas que atravessam a linha A da esquerda para a direita por unidade de tempo e por unidade de área é igual a $n_2 v_t/2$, enquanto o nú-

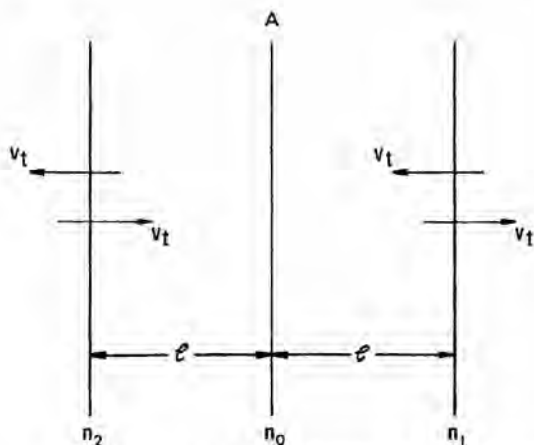



Figura 9.5 Processo de difusão

mero correspondente da direita para a esquerda é $n_1 v_t/2$, onde n_2 e n_1 são as concentrações de partículas à esquerda e à direita de linha *A*, respectivamente. O fluxo total de partículas por unidade de tempo e por unidade de área é dado por

$$S = v_t \frac{n_2 - n_1}{2}. \qquad \text{(Eq. 9.21)}$$

Como apenas as partículas que estão a uma distância igual ou menor que o caminho livre médio da linha *A* conseguem atravessá-la, a diferença $n_2 - n_1$ deve ser calculada a essa distância. Assim, $n_1 = n_0 + (\partial n/\partial x)l$ e $n_2 = n_0 - (\partial n/\partial x)l$, tomando apenas os primeiros dois termos da expansão em série de Taylor. Substituindo na Eq. 9.21, obtemos

$$S = -v_t \frac{\partial n}{\partial x} l. \qquad \text{(Eq. 9.22)}$$

Se as partículas possuem carga elétrica, o movimento dessas partículas constitui uma corrente, cuja densidade é dada por

$$J_d = -qS = qv_t l \frac{\partial n}{\partial x} = \frac{qkT\tau}{m^*} \frac{dn}{dx} = qD \frac{dn}{\partial x}, \qquad \text{(Eq. 9.23)}$$

onde, por definição, $l = v_t \tau$, $m^* v_t^2 = kT$. No caso tridimensional, a Eq. 9.23 fornece a componente x da corrente de difusão se substituirmos v_t pela componente x da velocidade, v_{tx}. A corrente J definida pela Eq. 9.23 é chamada de *corrente de difusão*. A constante D é chamada de coeficiente de difusão. Repare que de acordo com as Eqs. 9.7 e 9.23 existe uma relação entre D e μ: $D = kT\mu/q$. Essa relação é chamada de *relação de Einstein*.

9.3. SUPERPOSIÇÃO DOS PROCESSOS DE DERIVA E DIFUSÃO

De acordo com as Eqs. 9.11 e 9.23, a densidade total da corrente de elétrons ao longo do eixo dos x em um semicondutor é dada por

$$J_{nx} = qD_n \frac{\partial n}{\partial x} + q\mu_n n\varepsilon_x, \qquad \text{(Eq. 9.24)}$$

onde o primeiro termo representa a corrente de difusão e o segundo a corrente de deriva. Do mesmo modo, a corrente de buracos é dada por

$$J_{px} = -qD_p \frac{\partial p}{\partial x} + q\mu_p p \varepsilon_x. \qquad \text{(Eq. 9.25)}$$

EXERCÍCIOS

9.1. Sugira um método para medir a condutividade de um semicondutor.

9.2. Descreva dois métodos para verificar experimentalmente se um semicondutor é tipo P ou tipo N.

9.3. Calcule a resistividade de um cristal de silício com $1{,}4 \times 10^{16}$ átomos de fósforo por cm^3 e $1{,}0 \times 10^{16}$ átomos de boro por cm^3, à temperatura de 27 °C.

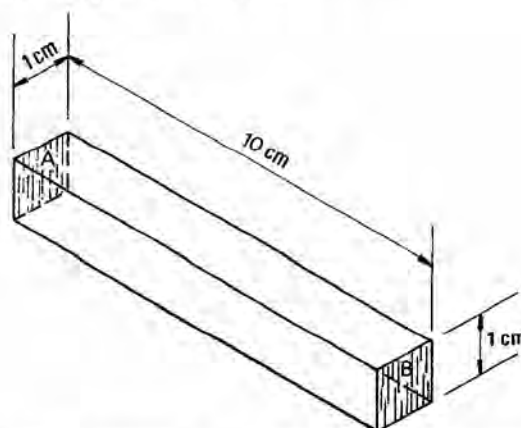
(*)9.4. Uma pequena concentração de portadores em minoria é injetada em um ponto de um cristal semicondutor homogêneo. Um campo elétrico de 10 V/cm é aplicado ao cristal; esse campo faz com que os portadores injetados percorram uma distância de 1 cm em 250 μs. Calcule a velocidade de *deriva* e o coeficiente de difusão dos portadores em minoria.

9.5. Em um cristal semicondutor, os elétrons têm uma mobilidade de 500 $cm^2/V \cdot s$. Calcule o tempo médio entre colisões. Para um campo elétrico de 100 V/cm, calcule também a distância média percorrida pelos elétrons entre duas colisões sucessivas. Nesses cálculos, use $m^* = m$, onde m é a massa do elétron livre.

(*)9.6. A resistência de um cristal de germânio tipo P (figura a seguir), entre os planos A e B, é igual a 100 Ω a 300 °K. Calcule a concentração de elétrons e buracos na amostra.

Dados:

para o germânio a 27 °C, $n_i = 2{,}4 \times 10^{13}\ cm^{-3}$;

$\mu_p = 1\,900\ cm^2/V\text{-}s$; $\mu_n = 3\,900\ cm^2/V\text{-}s$.

9.7. Considere um bloco retangular de GaAs de dimensões 1 mm × 1 mm (seção) e comprimento $l = 1$ cm, ao qual é aplicada uma tensão de 100 V no sentido do comprimento do bloco. Sabendo que o material possui 10^{15} elétrons/cm^3 e que a mobilidade dos elétrons é de $8 \times 10^3\ cm^2/V \cdot s$, calcule a corrente que circula no material.

(*)9.8. Considere um semicondutor intrínseco. Raciocinando qualitativamente, podemos dizer que a condutividade do material deve aumentar com a temperatura, já que à

medida que a temperatura aumenta o número de ligações covalentes que são rompidas também aumenta. Prove matematicamente que isso é verdade, isto é, que $d\sigma/dT$ é maior que zero para qualquer temperatura.

(*)9.9. Mostre que a velocidade média dos elétrons em um semicondutor submetido a um campo elétrico alternado da forma $\varepsilon = Re\,[\varepsilon_0 e^{i\omega t}]$ é dada por

$$<v> = Re\left[-\frac{q}{m^*}\,\frac{\tau}{1 + i\omega\tau}\,\varepsilon_0 e^{i\omega t}\right]$$

REFERÊNCIAS

FAN, H. Y., "Valence Semiconductors, Germanium and Silicon", em F. Seitz e D. Turnbull (eds.), *Solid State Physics*, Vol. 1 (New York: Academic Press, 1955).

RYDER, E. J., "Mobility of Holes and Electrons in High Electric Fields", *Phys. Rev.* **90**, 766 (1953).

BIBLIOGRAFIA

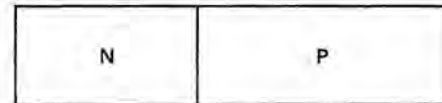
Conwell, E. M., *High Field Effects in Semiconductors* (New York: Academic Press, 1967).

Paige, E. G. S., *The Electrical Conductivity of Germanium*, em Progr. Semiconductors, Vol. 8 (1964).

10 Junções PN

Vamos agora aplicar os conhecimentos desenvolvidos nos capítulos anteriores ao estudo de um dispositivo semicondutor muito usado na prática: a junção *PN*, cuja estrutura está representada de forma esquemática na Fig. 10.1.

Como está indicado na figura, uma junção *PN* é um bloco de material semicondutor que consiste em duas regiões distintas, uma tipo *P* e outra do tipo *N*.

Figura 10.1 Representação esquemática de uma junção *P-N*

10.1. JUNÇÃO *PN* EM EQUILÍBRIO

Suponhamos, apenas para efeito de discussão, que acabamos de formar uma junção *PN*, simplesmente "justapondo" um bloco de material tipo *P* em um bloco de material tipo *N*. É claro que existem mais elétrons do lado *N* e mais buracos do lado *P*; assim, existe uma região em que $\partial n/\partial x$ e $\partial p/\partial x$ são diferentes de zero. Surge naturalmente a pergunta: haverá corrente, mesmo na ausência de campo elétrico externo? A resposta é sim, mas por tempo limitado. Se os elétrons e buracos não tivessem carga elétrica, as correntes de difusão continuariam até que as distribuições de elétrons e buracos fossem uniformes em todo o cristal. Mas como os elétrons e buracos possuem cargas elétricas e os cristais contêm os átomos ionizados das impurezas, a situação é bem diferente. À medida que, em conseqüência das correntes de difusão, os elétrons do lado *N* passam para o lado *P* e os buracos do lado *P* passam para o lado *N*, este vai se tornando mais positivo devido à presença de doadores ionizados, e o lado *P* vai se tornando mais negativo devido à presença de aceitadores ionizados. Assim, é criado um campo elétrico nas proximidades da junção, como vemos na Fig. 10.2.

Esse campo elétrico tem um sentido tal que tende a manter os buracos no lado *P* da junção e os elétrons no lado *N*. Assim, depois que um certo número de elétrons e buracos atravessa a junção, é criado um campo elétrico que interrompe o movimento de portadores.

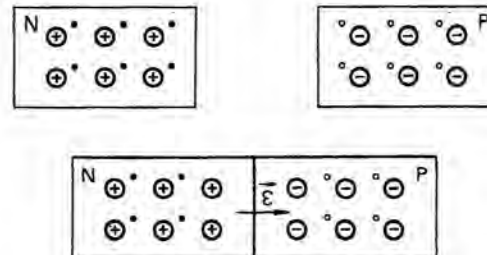



Figura 10.2 Distribuição de cargas no interior de uma junção *P-N* em equilíbrio

É assim que se atinge o equilibrio, no qual a corrente total é zero; as correntes de difusão dos elétrons e buracos são equilibradas exatamente pelas correntes de deriva devido ao campo elétrico interno.

Vamos agora traduzir essa afirmação em termos matemáticos. De acordo com a Eq. 9.25, a corrente de buracos é dada por

$$J_p = -qD_p \frac{\partial p}{\partial x} + q\mu_p p\varepsilon. \qquad \text{[Eq. 9.25]}$$

Substituindo nessa expressão a concentração de buracos por seu valor em termos do nível de Fermi intrínseco (Eq. 8.29)

$$p = n_i e^{(E_i - E_F)/kT} \qquad \text{[Eq. 8.29]}$$

e sua derivada

$$\frac{dp}{dx} = \frac{p}{kT}\left[\frac{dE_i}{dx} - \frac{dE_F}{dx}\right], \qquad \text{(Eq. 10.1)}$$

temos

$$J_p = -q\frac{D_p}{kT}p\left[\frac{dE_i}{dx} - \frac{dE_F}{dx}\right] + q\mu_p p\varepsilon. \qquad \text{(Eq. 10.2)}$$

Sabemos da eletrostática que, em uma dimensão,

$$\varepsilon = \frac{1}{q}\frac{\partial E}{\partial x}, \qquad \text{(Eq. 10.3)}$$

onde ε é o campo elétrico, E é a energia potencial da partícula considerada e q é a carga dessa partícula. Como vimos nos capítulos anteriores, a energia potencial do elétron é representada pela energia na borda da faixa de condução, E_c, e a energia de um buraco é representada pela energia na borda da faixa de valência, E_v. Entretanto como estamos interessados apenas na derivada da energia potencial, podemos usar qualquer nível de energia que seja paralelo às faixas de condução e de valência. Em particular, podemos escolher o nível de Fermi intrínseco e escrever

$$\varepsilon = \frac{1}{q}\frac{dE_i}{dx}. \qquad \text{(Eq. 10.4)}$$

Substituindo a Eq. 10.4 em 10.2 e usando a relação de Einstein $\mu_p = qD_p/kT$, obtemos

$$J_p = q\frac{D_p}{kT}p\frac{dE_F}{dx} = \mu_p p\frac{dE_F}{dx}. \qquad \text{(Eq. 10.5)}$$

Assim, para que a corrente total de buracos seja zero é preciso que o nível de Fermi não varie ao passarmos de um lado para outro da junção.

Se aplicarmos o mesmo tratamento matemático à corrente de elétrons, obteremos a expressão

$$J_n = q\frac{D_n}{kT}n\frac{dE_F}{dx} = \mu_n n\frac{dE_F}{dx}, \qquad \text{(Eq. 10.6)}$$

e portanto para que a corrente total de elétrons seja zero o nível de Fermi também deve ser constante. Assim, *em uma junção PN em equilíbrio o nível de Fermi é constante ao longo de todo o cristal.*

Para calcularmos as características da região de carga espacial que é formada nas proximidades da junção, vamos supor que ela consiste inteiramente nas cargas dos aceitadores e doadores ionizados. Isso equivale a dizer que a região de carga espacial está totalmente desprovida de portadores, ou melhor, que as concentrações de portadores n e p são desprezíveis em comparação com a concentração de impurezas na região de carga espacial.

Na Fig. 10.3(a) vemos a distribuição de cargas em uma junção *PN* em função da distância, para o caso em que a concentração de impurezas nas regiões p e n é uniforme.

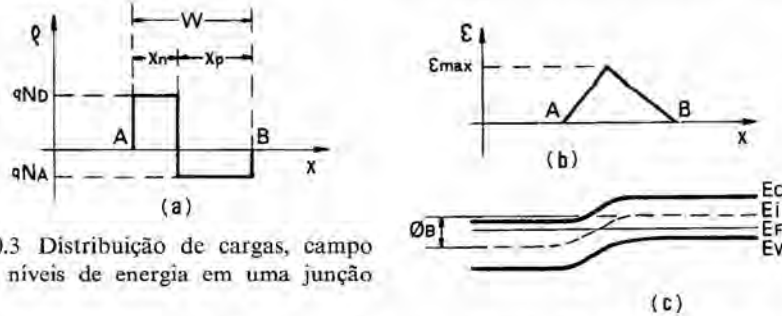



Figura 10.3 Distribuição de cargas, campo elétrico e níveis de energia em uma junção abrupta

Uma junção desse tipo é chamada de *junção abrupta*. As densidades de carga nos lados N e P da junção são dadas por qN_D e $-qN_A$, respectivamente. As larguras das duas partes da região de carga espacial são x_n e x_p e a largura total $(x_n + x_p)$ é chamada de W. A distribuição de campo elétrico, obtida por integração da distribuição de carga, está representada na Fig. 10.3(b). Integrando a distribuição de campo elétrico, obtemos a energia E_i dos elétrons em função da distância [Fig. 10.3(c)]. Naturalmente, de acordo com a Eq. 10.4, as bordas das faixas de condução e de valência acompanham as variações do nível de Fermi intrínseco E_i.

Vamos agora calcular a curvatura das faixas de energia, isto é, a variação da energia quando passamos do lado P para o lado N. Examinando a Fig. 10.3(c), vemos que, como o nível de Fermi é constante, a variação de energia é a soma de duas parcelas, E_{Fp} e E_{Fn}, que são definidas do seguinte modo:

$$E_{Fp} = E_F - E_i\big|_{\text{do lado } p}\,; \qquad E_{Fn} = E_i - E_F\big|_{\text{do lado } n}\,. \qquad \text{(Eq. 10.7)}$$

Para calcularmos os valores de E_{Fp} e E_{Fn}, vamos supor que na região P neutra, isto é, fora da região de carga espacial, $p \simeq N_A$, enquanto que na região N neutra, $n \simeq N_D$. Nesse caso, as Eqs. 8.28 e 8.29 fornecem

$$E_{Fp} = -kT\ln\frac{N_A}{n_i}\,; \qquad \text{(Eq. 10.8)}$$

$$E_{Fn} = -kT\ln\frac{N_D}{n_i}\,. \qquad \text{(Eq. 10.9)}$$

A variação total de energia E_T em equilíbrio será a soma de E_{Fp} e E_{Fn}:

$$E_T = E_{Fp} + E_{Fn}. \qquad \text{(Eq. 10.10)}$$

Como sabemos da eletrostática, o potencial elétrico de um elétron é dado por

$$\phi = -\frac{E}{q}, \qquad \text{(Eq. 10.11)}$$

onde E é a energia do elétron e q é a sua carga. Assim, a variação total do potencial elétrico ϕ através de uma junção PN em equilíbrio é dada por

$$\phi_B = -\frac{E_T}{q} = \frac{kT}{q} \ln \frac{N_A N_D}{n_i^2}. \qquad \text{(Eq. 10.12)}$$

O potencial ϕ_B é chamado de *potencial de difusão* da junção PN.

Como o campo elétrico nas regiões neutras do semicondutor deve ser zero, as cargas totais dos dois lados da junção devem ser iguais e opostas, isto é,

$$N_D x_n = N_A x_p. \qquad \text{(Eq. 10.13)}$$

O campo elétrico máximo da junção é dado por

$$\varepsilon_{\max} = \frac{qN_D x_n}{\epsilon} = \frac{qN_A x_p}{\epsilon}, \qquad \text{(Eq. 10.14)}$$

onde ϵ é a permissividade do material(*).

A variação total de potencial elétrico é dada pela área sob a curva da Fig. 10.3(b), ou seja

$$\phi_T = \frac{1}{2} \varepsilon_{\max} W. \qquad \text{(Eq. 10.15)}$$

Combinando as Eqs. 10.13, 10.14 e 10.15 e lembrando que $x_n + x_p = W$, vemos que nesse caso a largura da região de carga espacial é dada por

$$W = \sqrt{\frac{2\epsilon}{q} \cdot \frac{N_A + N_D}{N_A N_D} \phi_T} \qquad \text{(Eq. 10.16)}$$

onde, em equilíbrio, $\phi_T = \phi_B$.

Voltando à Eq. 9.25, vemos que em equilíbrio térmico, ou seja, quando $J_p = 0$, temos

$$q\mu_p p\varepsilon = qD_p \frac{\partial p}{\partial x} \qquad \text{(Eq. 10.17)}$$

ou, usando a relação de Einstein $\mu_p = D_p/kT$,

$$\frac{q\varepsilon}{kT} dx = \frac{dp}{p}. \qquad \text{(Eq. 10.18)}$$

Integrando a Eq. 10.18 de A a B [Fig. 10.3(a)], já que no resto do cristal o campo elétrico é zero, temos

$$\int_A^B \frac{dp}{p} = \frac{q}{kT} \int_A^B \varepsilon dx; \qquad \text{(Eq. 10.19)}$$

$$\ln \frac{p(B)}{p(A)} = \frac{q\phi_T}{kT}; \qquad \text{(Eq. 10.20)}$$

$$\frac{p_{po}}{p_{no}} = e^{q\phi_T/kT}, \qquad \text{(Eq. 10.21)}$$

(*)Novamente lembramos que ϵ = permissividade, ε = campo elétrico

onde p_{po} e p_{no} são as concentrações de buracos em equilíbrio térmico nas regiões P e N, respectivamente. Para os elétrons, a relação equivalente a Eq. 10.21 será

$$\frac{n_{po}}{n_{no}} = e^{-q\phi_T/kT}, \qquad \text{(Eq. 10.22)}$$

onde n_{po} e n_{no} são as concentrações de elétrons nas regiões P e N

10.2. JUNÇÃO POLARIZADA

10.2.1. Polarização direta e polarização inversa

Quando aplicamos à junção PN uma tensão V_I tal que o lado N fique positivo em relação ao lado P, a variação total de potencial elétrico através da junção aumenta de V_I. Assim,

$$\phi_T = \phi_B + V_I. \qquad \text{(Eq. 10.23)}$$

Em conseqüência, a largura da região de carga espacial aumenta. Essa situação está ilustrada na Fig. 10.4. Nessas condições, dizemos que a junção está polarizada inversamente.

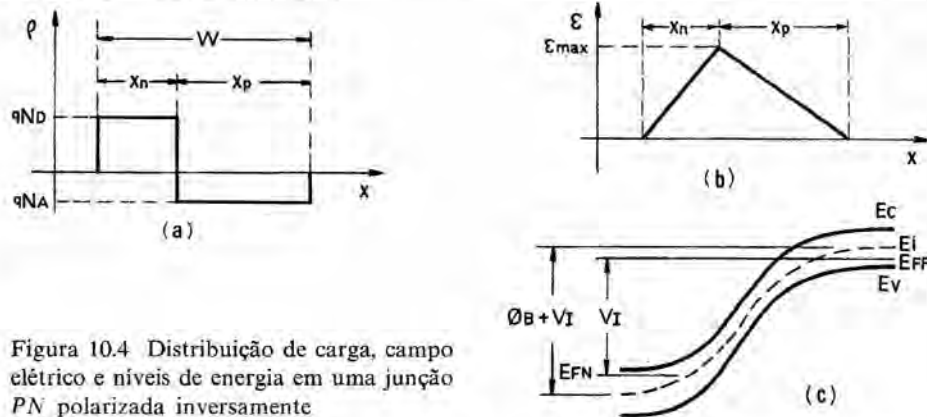



Figura 10.4 Distribuição de carga, campo elétrico e níveis de energia em uma junção PN polarizada inversamente

Substituindo a Eq. 10.23 na Eq. 10.16, podemos calcular a largura da região de carga espacial em função da tensão V_I aplicada.

Quando a junção é polarizada diretamente, isto é, quando aplicamos uma tensão V_D tal que o lado N fique negativo em relação ao lado P, a variação total de potencial elétrico diminui e portanto a largura da região de carga espacial tende a diminuir. Entretanto como veremos mais tarde, em uma junção polarizada diretamente a corrente é muito grande – imensamente maior do que no caso da polarização inversa. Assim a concentração de portadores na região de carga espacial se torna considerável e portanto a aproximação de que a carga espacial se deve apenas aos doadores e aceitadores ionizados, usada para deduzir a Eq. 10.16, perde sua validade.

10.2.2. Junção polarizada inversamente

Em condições de equilíbrio, pares elétron-buraco são gerados constantemente no cristal. Na ausência de campo elétrico externo, os pares elétron-

-buraco se recombinam e a corrente total é zero. Entretanto quando aplicamos uma tensão positiva à região *N* da junção *PN*, como na Fig. 10.4, os pares, uma vez formados, são imediatamente separados e sua probabilidade de recombinação diminui. Esse é o mecanismo básico que dá origem à corrente nas junções *PN* polarizadas inversamente. Todas as correntes em uma junção polarizada inversamente são devidas a pares elétron-buraco gerados no semicondutor. Esses pares podem ser gerados em duas regiões distintas do cristal: a região de carga espacial e as regiões neutras *P* e *N* longe da junção (Fig. 10.5).

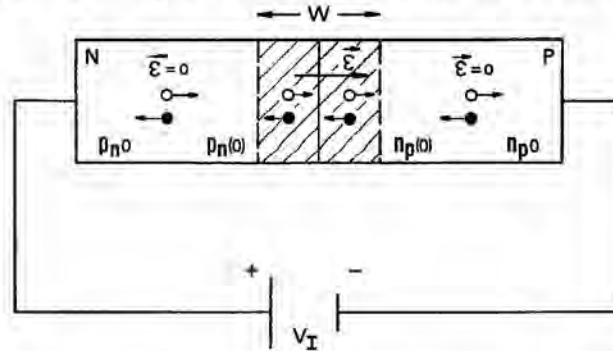



Figura 10.5 Junção *PN* polarizada inversamente, $n_p(0) = p_n(0) = 0$

A corrente que resulta da geração de pares elétron-buraco na região de carga espacial é chamada de *corrente de geração*. A corrente que resulta de pares criados nas regiões neutras é chamada de *corrente de difusão*. A principal diferença entre essas correntes é que enquanto os pares gerados na região de carga espacial estão submetidos a um campo elétrico e se movem principalmente por deriva, os pares gerados nas regiões neutras não sofrem a ação de campo elétrico algum e portanto podem mover-se apenas por difusão.

Demonstra-se que a densidade de corrente de geração é dada aproximadamente por

$$J_{\text{ger}} = \frac{1}{2} q \frac{n_i}{\tau} W, \qquad \text{(Eq. 10.24)}$$

onde n_i é a concentração intrínseca de portadores do material, τ é o tempo médio de vida dos portadores (tempo que os portadores levam para se recombinarem, depois que são gerados) e W é a largura da região de carga espacial.

A corrente de geração é proporcional à intensidade da tensão aplicada: quanto maior a tensão, maior a largura da região de carga espacial, W, e portanto maior o número de pares produzidos nesta região. Esta corrente também aumenta com a temperatura, pois n_i aumenta com a temperatura.

A densidade de corrente de difusão é dada aproximadamente por

$$J_{\text{dif}} = q\sqrt{\frac{D_n}{\tau}}\,[n_{po} - n_p(0)] + q\sqrt{\frac{D_p}{\tau}}\,[p_{po} - p_n(0)], \qquad \text{(Eq. 10.25)}$$

onde n_{po} e p_{no} são as densidades de portadores em minoria longe da região de carga espacial e $n_p(0)$ e $p_n(0)$ são as densidades de portadores em minoria na fronteira entre a região neutra e a região de carga espacial (Fig. 10.5).

Quando pares elétron-buraco são gerados na região N neutra, os buracos que chegam à região de carga espacial são levados imediatamente para a região P pelo campo elétrico que existe na região de carga espacial. Do mesmo modo, os elétrons da região P neutra que chegam à região de carga espacial são logo carregados para a região N. Assim, para uma junção polarizada inversamente,

$$n_p(0) = p_n(0) = 0. \qquad \text{(Eq. 10.26)}$$

E a Eq. 10.25 se reduz a

$$J_{\text{dif}} = qn_{po}\sqrt{\frac{D_n}{\tau}} + qp_{no}\sqrt{\frac{D_p}{\tau}}, \qquad \text{(Eq. 10.27)}$$

onde n_{po} e p_{no} são as densidades de portadores em minoria.

Para avaliarmos a importância relativa dessas duas correntes, vamos calcular a relação entre elas. De acordo com as Eqs. 10.24 e 10.27, temos

$$\frac{J_{\text{dif}}}{J_{\text{ger}}} = 2\,\frac{n_{po} + p_{no}}{n_i}\,\frac{\sqrt{D_n\tau}}{W}.$$

Como $n_{po}n_{no} = p_{no}p_{po} = n_i^2$ e tomando $n_{no} \simeq N_A$, $p_{po} \simeq N_D$, temos

$$\frac{J_{\text{dif}}}{J_{\text{ger}}} = 2n_i\left(\frac{N_A + N_D}{N_A \cdot N_D}\right)\frac{\sqrt{D_n\tau}}{W}. \qquad \text{(Eq. 10.28)}$$

Essa relação é portanto diretamente proporcional à concentração intrínseca de portadores, n_i. Assim à medida que a temperatura aumenta, a corrente de difusão se torna mais importante.

A corrente total em uma junção PN polarizada inversamente, que é chamada de *corrente inversa*, é dada por

$$I_I = A(J_{\text{ger}} + J_{\text{dif}}), \qquad \text{(Eq. 10.29)}$$

onde A é a área da junção.

10.2.3. Junção polarizada diretamente

Quando polarizamos diretamente uma junção PN, como na Fig. 10.6, a variação total de potencial elétrico, ϕ_T, diminui. Em equilíbrio, a condição de corrente zero era estabelecida por uma compensação exata entre as correntes de deriva e difusão de cada portador. Como em uma junção polarizada diretamente a variação de potencial elétrico e portanto o campo elétrico na região de carga espacial é menor do que em equilíbrio, a corrente de deriva dos portadores diminui e o equilíbrio entre as correntes de deriva e as correntes de difusão é rompido, o que torna a corrente total diferente de zero.

É importante observar que embora a diferença de potencial entre os dois lados da junção seja menor do que em equilíbrio, não desaparece totalmente. Em conseqüência, o campo elétrico na região de carga espacial ainda se opõe a que os elétrons no lado N e os buracos do lado P atravessem a junção. Assim, a corrente será contra o sentido do campo elétrico. Isso é possível graças aos enormes gradientes de concentração $\partial n/\partial x$ e $\partial p/\partial x$ que existem perto da junção.

Outro modo de encarar o fenômeno é o seguinte: quando aplicamos um potencial negativo ao lado N e um potencial positivo ao lado P da junção, os

Figura 10.6 Níveis de energia em uma junção *PN* polarizada diretamente

buracos da região *P* são "empurrados" em direção ao lado *N* e os elétrons da região *N* são "empurrados" em direção ao lado *P*. Os buracos e elétrons se encontram nas proximidades da junção, onde se recombinam em grandes quantidades.

À primeira vista, pareceria que em pouco tempo não haveria mais portadores no interior do cristal. Entretanto a fonte de tensão externa está constantemente *injetando* elétrons na região *N* e buracos na região *P*. Assim, os elétrons e buracos que se recombinam são imediatamente substituídos por outros. Esse movimento de portadores constitui uma corrente.

De acordo com essa segunda interpretação, a corrente direta resulta da recombinação de pares elétron-buraco, do mesmo modo que a corrente inversa, examinada no parágrafo anterior, resultava da geração de pares elétron-buraco no cristal.

Como no caso da corrente inversa, podemos dividir a corrente em duas componentes. A corrente que resulta da recombinação de pares elétron-buraco na região de carga espacial é chamada de *corrente de recombinação*; a corrente que resulta de recombinação nas regiões neutras *P* e *N* é chamada de *corrente de difusão*.

Demonstra-se que a densidade de corrente de recombinação é dada aproximadamente por

$$J_{rec} \simeq -\frac{1}{2} q \frac{n_i}{\tau} W e^{qV_D/2kT}, \qquad \text{(Eq. 10.30)}$$

onde V_D é a tensão aplicada.

A corrente de recombinação varia exponencialmente com a tensão aplicada.

A densidade de corrente de difusão é dada pela mesma expressão que a usada para o caso da polarização inversa, Eq. 10.25. Entretanto, no caso da polarização direta, as concentrações dos portadores em minoria na fronteira entre a região neutra e a região de carga espacial, $n_p(0)$ e $p_n(0)$, são diferentes de zero (Fig. 10.7).

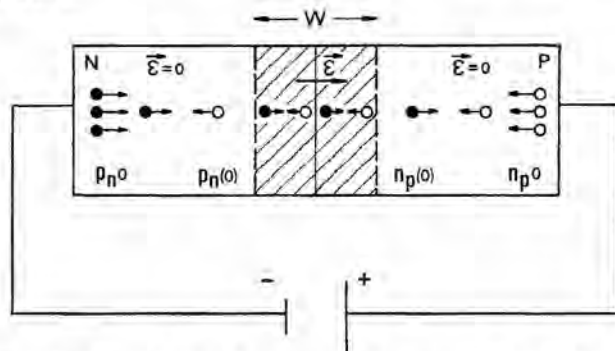



Figura 10.7 Junção *PN* polarizada diretamente, $p_n(0)$, $n_p(0) \neq 0$

Vamos calcular esses dois valores. Em primeiro lugar, é evidente que a diferença entre o nível de condução do lado P e o nível de condução do lado N, $E_{cp} - E_{cn}$, que era igual a ϕ_B em equilíbrio, passa a ser igual a $(\phi_B - V_D)$ quando polarizamos diretamente a junção (Fig. 10.6). Se supusermos que uma equação semelhante à Eq. 10.22 ainda é válida, a concentração de elétrons em minoria do lado P será dada por

$$n_p(0) = n_n e^{-q(\phi_B - V_D)/kT} = n_{po} e^{q\phi_B/kT} e^{-q(\phi_B - V_D)/kT} = n_{po} e^{qV_D/kT}. \qquad \text{(Eq. 10.31)}$$

Do mesmo modo, a concentração de buracos do lado N será dada por

$$p_n(0) = p_{no} e^{qV_D/kT}. \qquad \text{(Eq. 10.32)}$$

Substituindo as Eqs. 10.31 e 10.32 em 10.25, temos

$$J_{\text{dif}} = -\left[qn_{po}\sqrt{\frac{D_n}{\tau}} + qp_{no}\sqrt{\frac{D_p}{\tau}} \right] [e^{qV_D/kT} - 1]. \qquad \text{(Eq. 10.33)}$$

Como no caso da polarização inversa, vamos calcular a relação entre as duas correntes. De acordo com as Eqs. 10.30 e 10.33 temos

$$\frac{J_{\text{dif}}}{J_{\text{rec}}} = 2\,\frac{n_{po} + p_{no}}{n_i} \cdot \frac{\sqrt{D_n \tau}}{W} [e^{qV_D/kT} - 1] =$$

$$= 2n_i \left(\frac{N_A + N_D}{N_A \cdot N_D} \right) \frac{\sqrt{D_n \tau}}{W} \frac{[e^{qV_D/kT} - 1]}{e^{qV_D/2kT}}. \qquad \text{(Eq. 10.34)}$$

No caso da polarização direta, o fator mais importante da Eq. 10.34 é o fator exponencial. Em geral, para pequenos valores de tensão aplicada, a corrente de recombinação é a mais importante. À medida que V_D aumenta, a influência da corrente de difusão se torna cada vez maior.

A corrente total em uma junção PN polarizada diretamente, que é chamada de *corrente direta*, é dada por

$$I_D = A(J_{\text{rec}} + J_{\text{dif}}), \qquad \text{(Eq. 10.35)}$$

onde A é a área da junção.

10.3. EQUAÇÃO DO DIODO IDEAL

Vamos agora calcular a relação entre a corrente direta e a corrente inversa. De acordo com as Eqs. 10.24, 10.27, 10.29, 10.30, 10.34 e 10.35, temos

$$\left| \frac{I_D}{I_I} \right| = \frac{\dfrac{1}{2}\dfrac{n_i}{\tau} W e^{qV_D/2kT} + \left(n_{po}\sqrt{\dfrac{D_n}{\tau}} + p_{no}\sqrt{\dfrac{D_p}{\tau}} \right)(e^{qV_D/kT} - 1)}{\dfrac{1}{2}\dfrac{n_i}{\tau} W + n_{po}\sqrt{\dfrac{D_n}{\tau}} + p_{no}\sqrt{\dfrac{D_p}{\tau}}}.$$

Se supusermos que tanto a corrente direta como a corrente inversa são dominadas pelas correntes de difusão, teremos

$$\left| \frac{I_D}{I_I} \right| = e^{qV_D/kT} - 1;$$

$$I_D = I_s(e^{qV_D/kT} - 1), \qquad \text{(Eq. 10.36)}$$

onde

$$I_s = -I_I = -\left(n_{po}\sqrt{\frac{D_n}{\tau}} + p_{no}\sqrt{\frac{D_p}{\tau}}\right)A.$$

A relação entre corrente e tensão dada pela Eq. 10.36 é chamada de equação do diodo ideal e está representada graficamente na Fig. 10.8. Para tensões inversas $V_I \gg kT/q$, a corrente tende para o valor constante $I_I = -I_s$. A corrente I_s é chamada de *corrente inversa de saturação*. Para tensões diretas $V_D \gg kT/q$, a corrente aumenta exponencialmente: $I_D \simeq I_s\, e^{qV_D/kT}$.

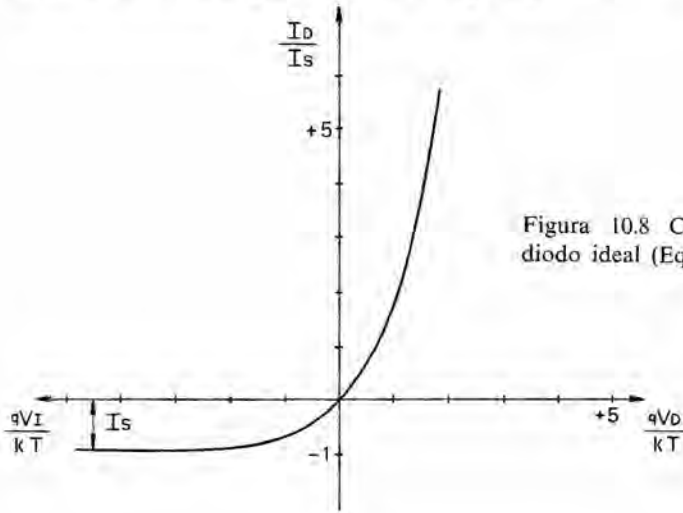



Figura 10.8 Curva característica do diodo ideal (Eq. 10.36)

10.4. CAPACITÂNCIA DE UMA JUNÇÃO *PN*

A capacitância dinâmica por unidade de área de um material qualquer de seção reta uniforme é definida por

$$C = \frac{dQ}{dV}, \qquad \text{(Eq. 10.37)}$$

onde dQ é a variação incremental de carga por unidade de área e dV é a variação incremental de tensão aplicada.

No caso de uma junção *PN*, uma variação na tensão aplicada faz variar a carga espacial e portanto a junção *PN* possui uma capacitância diferente de zero.

Para calcularmos o valor desta capacitância, suponhamos que a carga espacial total de um dos lados da junção é Q (do outro lado da junção, naturalmente, a carga será $-Q$). Nesse caso, quando aumentamos a tensão aplicada à junção de uma quantidade dV, a carga aumenta de dQ. De acordo com a Equação de Poisson, a variação de campo elétrico é dada por

$$d\varepsilon = \frac{dQ}{\epsilon}, \qquad \text{(Eq. 10.38)}$$

onde ϵ é a permissividade do material.

Por outro lado, a variação dV da tensão aplicada é dada por

$$dV = Wd\varepsilon, \tag{Eq. 10.39}$$

onde W é a largura da região de carga espacial.

Combinando as Eqs. 10.37, 10.38 e 10.39 obtemos

$$C = \frac{\epsilon}{W}. \tag{Eq. 10.40}$$

A Eq. 10.40 é válida para qualquer distribuição de impurezas.

Como exemplo, vamos calcular a capacitância de uma junção abrupta.

De acordo com a Eq. 10.16, a largura da região de carga espacial de uma junção abrupta é dada por

$$W = \sqrt{\frac{2\epsilon}{q}\frac{N_A + N_D}{N_A N_D}\phi_T}. \qquad \text{[Eq. 10.16]}$$

Combinando a Eq. 10.16 com a Eq. 10.40, obtemos

$$C = \sqrt{\frac{q\epsilon N_A N_D}{2\phi_T(N_A + N_D)}} = \sqrt{\frac{q\epsilon}{2(\phi_B + V)}\cdot\frac{N_A N_D}{N_A + N_D}}, \tag{Eq. 10.41}$$

onde V é a tensão externa aplicada à junção. Repare que V é positivo quando a polarização é inversa e negativo quando a polarização é direta.

A Eq. 10.41 mostra um fato muito importante: a capacitância de uma junção *PN* depende da tensão externa aplicada. Embora esse fato tenha sido demonstrado apenas para a junção abrupta, ocorre também em outros tipos de junção. Esse fenômeno é utilizado em uma classe de dispositivos semicondutores, os chamados *varactores*, que são usados como capacitores variáveis. Os varactores não passam de junções *PN* cuja capacitância é controlada por uma tensão externa.

10.5. RUPTURA DE UMA JUNÇÃO *PN*

Como vimos, a junção *PN* apresenta uma baixa resistência quando é polarizada diretamente e uma resistência elevada quando é polarizada inversamente. Entretanto todas as junções *PN* também apresentam uma baixa resistência quando são polarizadas inversamente com uma tensão suficientemente elevada. Esse fenômeno é chamado de *ruptura da junção*. A ruptura pode ser causada por dois mecanismos, que estudaremos a seguir.

10.5.1. Efeito Zener

Quando um semicondutor é submetido a um campo elétrico elevado, como o que existe por exemplo na região de carga espacial de uma junção *PN* polarizada inversamente, as ligações covalentes ficam distorcidas. Se o campo elétrico for suficientemente intenso, as ligações podem ser rompidas, com a formação de pares elétron-buraco. Essa ruptura de ligações covalentes por efeito direto do campo elétrico é chamada de *efeito Zener*.

10.5.2. Efeito de avalanche

Outro mecanismo que pode provocar a ruptura da junção é o efeito de avalanche, o qual ocorre quando os portadores gerados termicamente no interior da região de carga espacial são acelerados pelo campo elétrico aplicado e adquirem suficiente energia cinética para romperem ligações covalentes. A ruptura de ligações covalentes produz novos portadores, que por sua vez são acelerados pelo campo, rompem novas ligações covalentes, etc. Devido a essa "reação em cadeia", o fenômeno é chamado de efeito de avalanche.

É evidente que a energia cinética adquirida pelos portadores entre duas colisões é diretamente proporcional à tensão inversa aplicada e ao caminho livre médio dos portadores. Para baixas concentrações de portadores, o caminho livre médio é maior e a ruptura é provocada pelo efeito de avalanche; para altas concentrações, a ruptura, em geral, é provocada pelo efeito Zener.

A Fig. 10.9 mostra a curva característica de uma junção *PN* real, onde podemos ver claramente o fenômeno da ruptura.

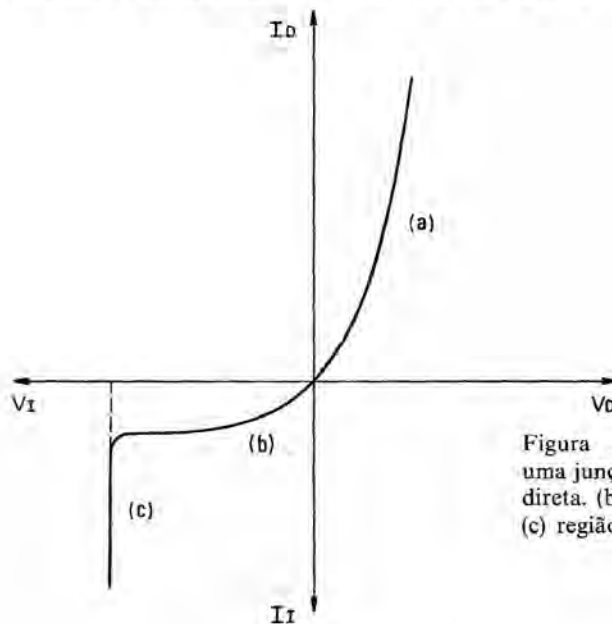



Figura 10.9 Curva característica de uma junção *PN*. (a) região de condução direta. (b) região de condução inversa; (c) região de ruptura

EXERCÍCIOS

(*)10.1. Em uma junção *PN* abrupta de germânio, a concentração N_A de átomos aceitadores do lado *P* é igual à concentração N_D de átomos doadores do lado *N*: $N_A = N_D = 10^{15}$ átomos/cm³.

Calcule a largura da região de carga espacial:

a) para uma polarização direta de 0,1 V;

b) para uma polarização inversa de 0,1 V.

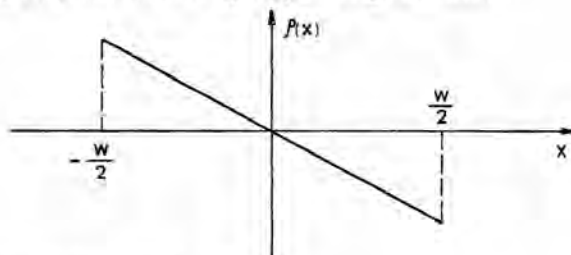
Suponha que todas as impurezas estão ionizadas e que a temperatura da junção é 300 K.

Dados: para o germânio a 300 K, $n_i = 2{,}4 \times 10^{13}\ \text{cm}^{-3}$;

$$\epsilon = 16{,}3\epsilon_0 = 1{,}4 \times 10^{-12}\ \text{F/cm}.$$

10.2. Na figura a seguir, vemos a distribuição de cargas em uma junção *PN* em função da distância, para o caso em que a distribuição de impurezas varia linearmente entre as duas regiões. Uma junção desse tipo é chamada de *junção gradual*. A distribuição de cargas (e de impurezas) em uma junção gradual é caracterizada pelo gradiente de concentração *a*, definido pela equação

$$\rho(x) = -qax \quad (-W/2 \leq x \leq W/2)$$

onde $\rho(x)$ é a densidade de carga e q é a carga do elétron.

Para uma junção gradual, pede-se

a) o potencial de difusão ϕ_B da junção;

b) a distribuição de campo elétrico $\mathscr{E}(x)$ na região de carga espacial,

c) a largura da região de carga espacial quando uma tensão inversa V_r é aplicada externamente à junção.

Dados

1. O gradiente de concentração, a.
2. A largura da região de carga espacial em equilíbrio, W_0.
3. A temperatura da junção, T.

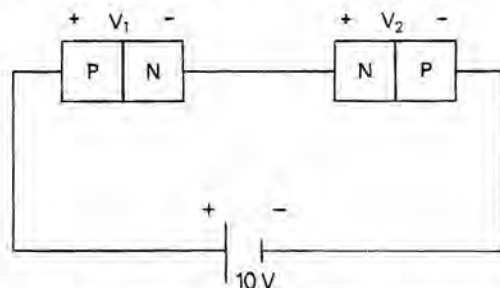
Suponha conhecidos os parâmetros do material de que é feita a junção.

(*)10.3. Duas junções *PN* são ligadas em oposição, como na figura a seguir. Pede-se

a) a tensão entre os terminais de cada uma das junções;

b) a corrente no circuito.

Dados

1. As duas junções obedecem à equação do diodo ideal.
2. A corrente inversa de saturação das duas junções é 10 μA.
3. A temperatura das junções é 27 °C.

10.4. Um meio de detetar a presença de radiações — raios gama, por exemplo — é utilizar uma junção inversamente polarizada. Se a tensão inversa é conveniente-

mente escolhida, a largura da região de transição é tal que os fótons dos raios gama perdem toda a sua energia dentro da região de transição.

a) Explique como funciona este detetor de radiação.

b) Qual a necessidade de a partícula perder toda a sua energia dentro da região de transição?

c) Que acontece quando a corrente de fuga é muito elevada?

d) Que é mais vantajoso, dopar mais fortemente a região N (lado em que a radiação incide) ou a região P? Justifique.

BIBILIOGRAFIA

Grove, A. S., *Physics and Technology of Semiconductor Devices* (New York: John Wiley, 1967), Cap. 6

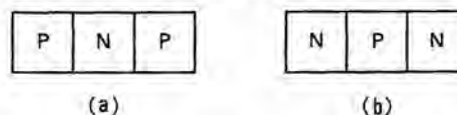
Mello, H. A. e Intrator, E., *Dispositivos Semicondutores* (Rio de Janeiro: Ao Livro Técnico, 1972).

11 Transistores de junção

O dispositivo semicondutor mais usado hoje em dia é sem dúvida o transistor de junção. Sua invenção revolucionou a eletrônica, tornando possível a fabricação de aparelhos mais compactos, mais eficientes e mais econômicos. Neste capítulo vamos estudar os princípios de funcionamento dos transistores de junção, baseando-nos na teoria das junções *PN*, estudada no capítulo anterior.

11.1. Estrutura do transistor de junção

A estrutura do transistor de junção está representada de forma esquemática na Fig. 11.1. Como podemos ver na ilustração, o transistor de junção é um bloco de material semicondutor que consiste de três regiões distintas. Existem dois tipos de transistores de junção. No primeiro, o tipo *PNP*, Fig. 11.1(a), a região central é do tipo *N* e as regiões externas são do tipo *P*. No segundo, o tipo *NPN*, a região central é do tipo *P* e as regiões externas são do tipo *N*.

Figura 11.1 Representação esquemática da estrutura de transistores de junção: (a) *PNP*; (b) *NPN*

De acordo com o que vimos no capítulo anterior, o transistor pode ser considerado como a combinação de duas junções *PN* (Fig. 11.2).

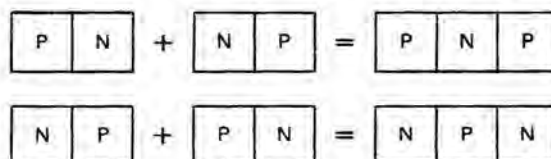
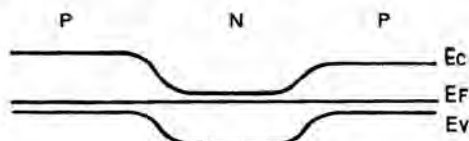



Figura 11.2 Combinação puramente esquemática de duas junções, compondo um transistor

11.2. TRANSISTOR EM EQUILÍBRIO

Quando o transistor não está submetido a tensão externa alguma, ele se comporta como duas junções *PN* em equilíbrio. Nesse caso, como vimos no capítulo anterior, aparecem campos elétricos nas proximidades das junções que equilibram as correntes de difusão de elétrons e buracos. A Fig. 11.3 mostra o diagrama de níveis de energia de um transistor *PNP* em equilíbrio.

Figura 11.3 Diagrama de níveis de energia em um transistor *PNP* em equilíbrio

11.3. TRANSISTOR POLARIZADO

Suponhamos agora que polarizamos diretamente uma das junções e polarizamos inversamente a outra junção (Fig. 11.4).

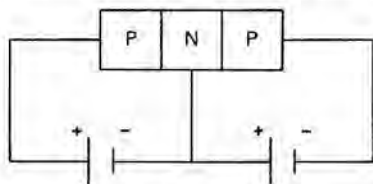



Figura 11.4 Polarização das junções de um transistor

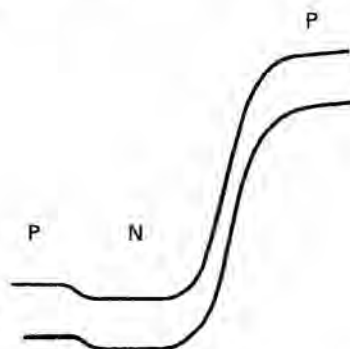



Figura 11.5 Diagrama de níveis de energia em um transistor polarizado

Nesse caso, o diagrama de níveis de energia será o representado na Fig. 11.5.

A parte central do transistor é chamada de *base*; a parte externa da junção polarizada diretamente é chamada de *emissor*; a parte externa da junção polarizada inversamente é chamada de *coletor*.

À primeira vista poderia parecer que em um transistor polarizado, como na Fig. 11.4, a corrente de emissor seria muito maior que a corrente de coletor, já que a junção emissor-base está polarizada diretamente e a junção base-coletor está polarizada inversamente. Entretanto, se a base for suficientemente estreita, a corrente de coletor será quase igual à corrente de emissor.

Para compreendermos por que isso acontece, vamos examinar a Fig. 11.6.

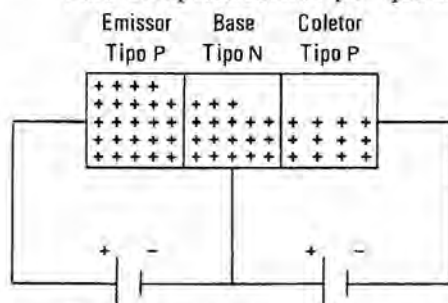



Figura 11.6 Funcionamento de um transistor *PNP*

Repare que quando a junção emissor-base está polarizada diretamente, um grande número de buracos atravessa a junção e penetra na região da base. Alguns desses buracos se combinam com os elétrons da base tipo *N*, como em uma junção *PN* comum; entretanto, se a base for muito estreita, a maioria dos buracos chegará a junção base-coletor. Assim que cruzam a junção base-coletor, esses buracos são atraídos para o terminal do coletor.

Como vimos no capítulo anterior, os buracos que deixam o emissor são imediatamente substituídos por novos buracos criados nas vizinhanças do terminal de emissor, que retira elétrons da região tipo *P*. Da mesma forma, os elétrons perdidos pela base ao se recombinarem com os buracos que cruzam a junção emissor-base são substituídos por novos elétrons, introduzidos através

do terminal de base. Os buracos que chegam ao terminal de colêtor se combinam com elétrons injetados por esse terminal na região tipo *P*.

Ora o movimento dos elétrons constitui uma corrente elétrica. Usando o sentido convencional da corrente (sentido contrário ao do deslocamento dos elétrons), podemos apresentar as correntes em um transistor *PNP* como na Fig. 11.7.

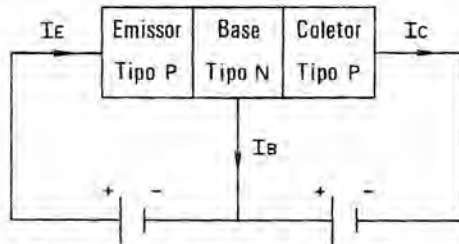



Figura 11.7 Correntes em um transistor *PNP*

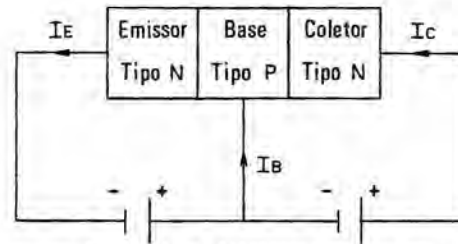



Figura 11.8 Correntes em um transistor *NPN*

No caso de um transistor *NPN*, a situação está representada na Fig. 11.8. Repare que nos dois casos devemos ter

$$I_E = I_C + I_B. \qquad \text{(Eq. 11.1)}$$

11.4. GANHO DO TRANSISTOR DE JUNÇÃO

Quando usamos um transistor em um circuito eletrônico, em geral estamos interessados em obter um ganho, isto é, em obter uma corrente ou tensão de saída maior que a corrente ou tensão de entrada.

No caso de um transistor polarizado como na Fig. 11.7 ou 11.8, considerando o terminal de emissor como o terminal de entrada e o terminal de coletor como terminal de saída, temos

$$\text{Ganho de corrente} = \frac{I_C}{I_E} = \frac{I_C}{I_C + I_B}. \qquad \text{(Eq. 11.2)}$$

Esse ganho de corrente é representado pelo símbolo α.

Examinando a Eq. 11.2, podemos ver que α é sempre menor que 1. Entretanto, se a base for muito estreita, quase toda a corrente de emissor chegará ao coletor e α será muito próximo de 1. Assim, por exemplo, se 98% dos portadores injetados pelo emissor chegarem ao coletor e apenas 2% se recombinarem na base, teremos

$$\alpha = \frac{I_C}{I_E} = \frac{0{,}98}{1{,}00} = 0{,}98.$$

Surge imediatamente a pergunta: se a corrente de saída é sempre menor que a corrente de entrada, como podemos usar um transistor para amplificar um sinal? Existem duas respostas para essa pergunta: em primeiro lugar, não somos obrigados a considerar o emissor como entrada e o coletor como saída; existem outras maneiras de aplicar o sinal ao transistor, como veremos daqui a pouco, que permitem um ganho de corrente maior que 1. Em segundo lugar,

mesmo considerando o emissor como entrada e o coletor como saída, podemos obter um ganho de tensão e um ganho de potência maiores que a unidade. Vamos examinar essa segunda afirmação.

Considerando apenas o transistor, sem levar em conta as resistências externas do circuito, a tensão de entrada é igual ao produto da corrente de emissor pela resistência da junção emissor-base e a tensão de saída é igual ao produto da corrente de coletor pela resistência da junção base-coletor. Assim, temos

$$\text{Ganho de tensão} = \frac{\text{Tensão de saída}}{\text{Tensão de entrada}} = \frac{I_C R_{BC}}{I_E R_{EB}} = \alpha \frac{R_{BC}}{R_{EB}},$$

onde α é o ganho de corrente, R_{BC} é a resistência da junção base-coletor e R_{EB} é a resistência da junção emissor-base.

Ora, como a junção emissor-base está polarizada diretamente, sua resistência é pequena; como a junção base-coletor está polarizada inversamente, sua resistência é elevada. Em conseqüência, a relação R_{BC}/R_{EB} é muito maior que a unidade e portanto o ganho de tensão é elevado. O ganho de potência, que é dado pelo produto do ganho de tensão pelo ganho de corrente, também é elevado. Vejamos um exemplo numérico.

11.5. EXEMPLO

No circuito da Fig. 11.7, a resistência da junção emissor-base é $25\,\Omega$ e a resistência da junção base-coletor é $50\,\text{k}\Omega$. Sabemos que 98% dos buracos injetados na base chegam ao coletor. Calcule o ganho de corrente, o ganho de tensão e o ganho de potência do transistor.

Solução:

Ganho de corrente $= \alpha = 0{,}98$;

$$\text{Ganho de tensão} = \alpha \frac{R_{BC}}{R_{EB}} = 0{,}98 \times \frac{50\,000}{25} = 1\,960;$$

$$\text{Ganho de potência} = \text{Ganho de corrente} \times \text{Ganho de tensão} = 0{,}98 \times 1\,960 = 1\,920.$$

11.6. FUNCIONAMENTO DO TRANSISTOR NA CONFIGURAÇÃO BASE COMUM

Quando o sinal de entrada é aplicado ao emissor do transistor e o sinal de saída é colhido no coletor, como supusemos até agora, dizemos que o tran-

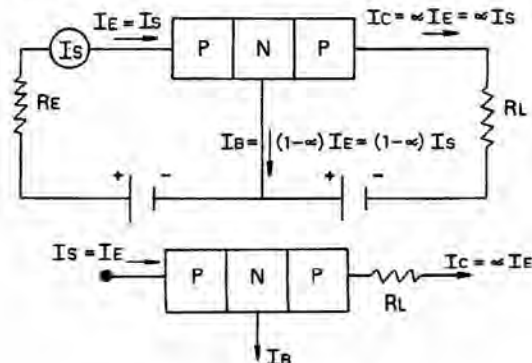



Figura 11.9 Ligação base comum

sistor está funcionando na configuração *base comum.* A Fig. 11.9, mostra as correntes em um circuito base comum.

Quando um transistor funciona na configuração base comum, como na Fig. 11.9, a corrente de sinal (I_S) é aplicada ao emissor. A corrente de saída, αI_S, atravessa o resistor de carga, R_L, produzindo uma queda de tensão que é a tensão de saída do amplificador.

O ganho de corrente α, definido como I_C/I_E, é chamado de *ganho de corrente base comum.*

11.7. FUNCIONAMENTO DE TRANSISTOR NA CONFIGURAÇÃO EMISSOR COMUM

Como vimos no início deste capítulo, o ganho de corrente base comum, α, é muito próximo da unidade. Isso significa que a corrente de base é pequena em comparação com as correntes de emissor e coletor do transistor. Com efeito, combinando as Eqs. 11.1 e 11.2, obtemos

$$I_B = I_E - I_C = I_E - \alpha I_E = I_E(1-\alpha) \qquad \text{(Eq. 11.3)}$$

Assim, se tomarmos $\alpha = 0{,}98$, teremos

$$I_B = 0{,}02\ I_E = 0{,}0204\ I_C$$

O fato de que a corrente de base de um transistor é muito menor que as correntes de emissor e coletor sugere o uso da base como terminal de entrada. Quando o sinal de entrada é aplicado à base e o sinal de saída é colhido no coletor, dizemos que o transistor está funcionando na configuração *emissor comum.* A Fig. 11.10 mostra as correntes em um circuito emissor comum.

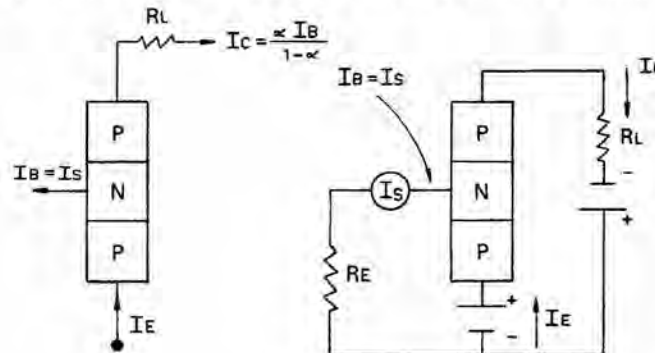



Figura 11.10 Ligação emissor comum

Quando um transistor funciona na configuração emissor comum como na Fig. 11.10, a corrente de sinal ($I_S = I_B$) é aplicada à base. A corrente de saída, I_C, atravessa o resistor de carga, R_L, produzindo uma queda de tensão que é a tensão de saída do amplificador. Vamos calcular o valor dessa corrente de saída em função da corrente de entrada.

De acordo com as Eqs. 11.1 e 11.2, temos

$$I_C = I_E - I_B = I_C/\alpha - I_B.$$

Então

$$\alpha I_C = I_C - \alpha I_B,$$

$$I_C = \frac{\alpha}{1-\alpha} I_B.$$

Se definirmos agora o *ganho de corrente emissor comum*, β, como a relação entre a corrente de saída e a corrente de entrada nessa configuração teremos

$$\beta = \frac{I_C}{I_B} = \frac{\alpha}{1-\alpha}.$$

Tomando $\alpha = 0{,}98$, temos

$$\beta = 49.$$

Podemos ver portanto que na configuração emissor comum o ganho de corrente pode ser bastante elevado. O ganho de tensão e o ganho de potência, que também são elevados, podem ser calculados do mesmo modo que na configuração base comum, conhecidas as resistências de entrada e saída do transistor.

11.8. TRANSISTORES DE DERIVA(*)

Até agora supusemos que a distribuição de impurezas na base do transistor era uniforme. Nos *transistores de deriva*, a concentração de impurezas na base é muito maior em uma das extremidades da base do que na outra (Fig. 11.11).

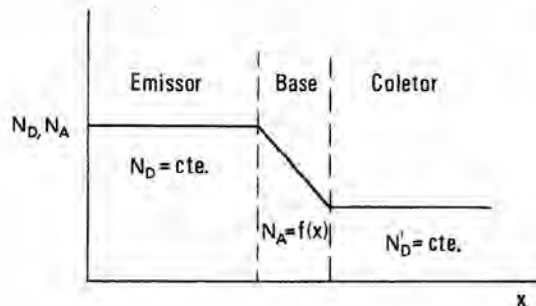



Figura 11.11 Distribuição de impurezas em um transistor de deriva *NPN*

Naturalmente, a variação na concentração de impurezas produz uma variação proporcional na concentração de portadores em maioria. Em conseqüência da variação na concentração de portadores, existe uma corrente de difusão no interior da base. Entretanto nas condições de equilíbrio, a corrente total na região da base deve ser zero, de modo que surge um campo elétrico no interior da base tal que a corrente de deriva seja igual e oposta à corrente de difusão.

No caso de um transistor *NPN*, a corrente de difusão na base tende a acumular buracos nas vizinhanças da junção base-coletor. Assim, o sentido do

(*) Em inglês, *drift transistors*

campo elétrico deve ser tal que a corrente de deriva dos buracos na base seja do coletor para o emissor. Ora, um campo elétrico com esse sentido acelera os elétrons injetados pelo emissor em direção ao coletor. Em conseqüência, o tempo que os portadores injetados pelo emissor levam para atravessar a base é muito menor nos transistores de deriva do que nos transistores comuns, em que os portadores se movimentam apenas por difusão. Levando menos tempo para atravessarem a base, os portadores injetados têm menos tempo para se recombinarem com os portadores da base. O resultado é que o ganho de corrente dos transistores de deriva é muito elevado.

BIBLIOGRAFIA

Phillips, A. B., *Transistor Engineering* (New York: McGraw-Hill, 1962)

Mello, H. A. e Intrator, E., *Dispositivos Semicondutores* (Rio de Janeiro: Ao Livro Técnico, 1972).

12 Outros fenômenos observados nos semicondutores

12.1. EMISSÃO DE LUZ

A recombinação de um par elétron-buraco envolve a liberação de uma certa quantidade de energia, equivalente à necessária para romper uma ligação covalente. Na maioria dos casos, essa energia assume a forma de vibrações mecânicas (emissão de fônons). Em determinadas circunstâncias, entretanto, a energia pode ser irradiada sob a forma de ondas luminosas (emissão de fótons).

Assim, por exemplo, se submetermos um cristal de fosfeto de gálio a radiação ultravioleta, o cristal emitirá uma luz vermelho-alaranjada. O que acontece é que a radiação ultravioleta rompe muitas ligações covalentes no cristal, criando um excesso de pares elétron-buraco. Ao se recombinarem, os pares emitem uma radiação visível.

O mesmo fenômeno também pode ser observado nas junções *PN* de certos semicondutores. Quando uma junção *PN* é polarizada diretamente, ocorre um grande número de recombinações nas proximidades da junção. Quando as condições são favoráveis, essas recombinações podem produzir luz visível.

Normalmente, esse efeito não pode ser observado nos semicondutores mais comuns, o germânio e o silício, porque nesses materiais a grande maioria das recombinações resulta na emissão de fônons (vibrações mecânicas). Por outro lado, em alguns semicondutores compostos, como o fosfeto de gálio e o arseneto de gálio, o efeito é bem acentuado.

Finalmente, é preciso observar que a luz pode ser emitida pelo cristal de forma incoerente — sem uma fase definida —, ou de forma coerente — com uma fase bem definida. No primeiro caso, o fenômeno é chamado de *luminescência*; no segundo, de *efeito laser*.

12.2. EFEITO TÚNEL

Quando a densidade de portadores nas regiões *P* e *N* de uma junção *PN* atinge o nível de degeneração, a junção passa a apresentar novas propriedades. Vejamos como isso acontece.

Na Fig. 12.1(a) vemos o diagrama de níveis de energia de uma junção *PN* degenerada(*). Nesse caso, o nível de Fermi está acima da base da faixa de condução do lado *N* da junção e abaixo do topo da faixa de valência do lado *P*. Os níveis ocupados estão indicados pela parte sombreada do desenho.

Se aplicarmos à junção uma pequena polarização (negativa do lado *N*, positiva do lado *P*), haverá uma corrente composta de duas parcelas: a primeira corresponde à corrente de uma junção *PN* normal; a segunda é conseqüência do chamado *efeito túnel*. De acordo com a Mecânica quântica, uma partícula tem uma probabilidade finita de atravessar uma barreira de potencial, embora classicamente não tenha energia suficiente para vencer a barreira. Assim, com

(*)Para uma discussão do fenômeno da degeneração, veja Wannier, G. H., *Elements of Solid State Theory* (Londres: Cambridge University Press, 1960), p. 149

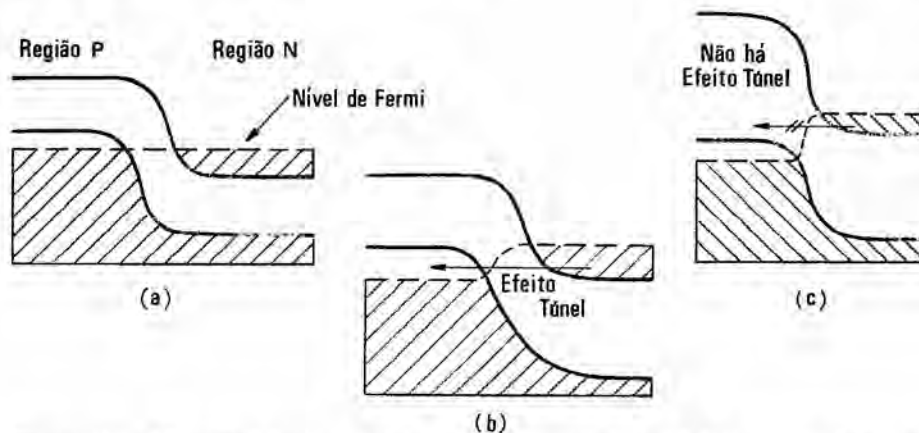



Figura 12.1 Efeito túnel em uma junção *PN* degenerada. (a) Junção em equilíbrio; (b) Junção submetida a uma pequena polarização direta, que produz o efeito túnel; (c) Junção submetida a uma polarização direta mais elevada. O efeito túnel deixou de existir

uma pequena polarização direta, os elétrons podem passar da região *N* para a região *P*, ocupando os estados vagos da faixa de valência da região *P*, como na Fig. 12.1(b). Entretanto se aumentarmos a polarização de maneira tal que a base da faixa de condução do lado *N* tenha energia superior ao topo da faixa de valência do lado *P*, como na Fig. 12.1(c), a corrente devido ao efeito túnel será reduzida a zero, pois não haverá estados disponíveis para os elétrons do lado *P* com a mesma energia que eles possuíam do lado *N* (no efeito túnel, a energia é conservada). Em conseqüência, a corrente total diminuirá. Se aumentarmos ainda mais a polarização, a corrente tornará a aumentar, devido ao aumento da corrente normal da junção.

Assim, a característica corrente-tensão de uma junção *PN* degenerada polarizada diretamente tem a forma que vemos na Fig. 12.2. Repare que a curva apresenta uma região em que a resistência é *negativa*.

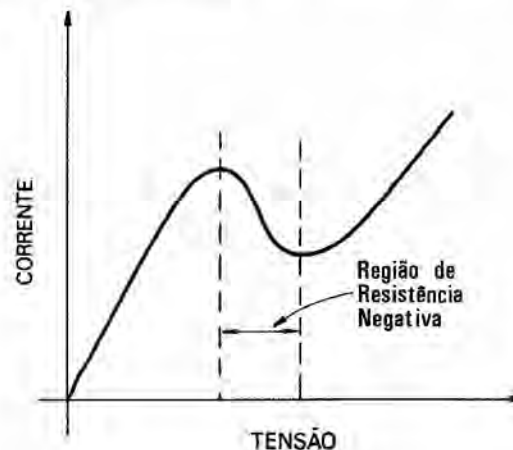



Figura 12.2 Curva característica corrente-tensão de um diodo túnel

O *diodo túnel*, como é chamado o dispositivo baseado nesse efeito, pode ser usado como elemento ativo nos circuitos, por exemplo, como oscilador de microondas.

Os diodos túnel em geral são feitos de germânio, silício ou arsenieto de gálio.

12.3. EFEITO HALL

Suponhamos que um cristal seja submetido simultaneamente a um campo elétrico e a um campo magnético, perpendiculares entre si (Fig. 12.3).

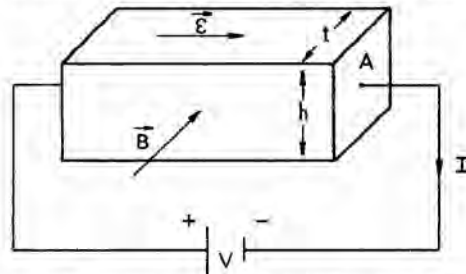



Figura 12.3 Geometria do efeito Hall

O campo elétrico pode ser aplicado, por exemplo, ligando-se uma fonte de tensão V às extremidades do cristal. O campo magnético pode ser aplicado colocando-se o cristal entre os pólos de um eletroímã.

Sob a ação do campo elétrico, os portadores do cristal adquirem uma certa velocidade de deriva, $\vec{v}$. Ora, sabemos do eletromagnetismo que uma partícula carregada sob a ação de um campo magnético $\vec{B}$ está sujeita a uma força perpendicular à direção do movimento e à direção do campo magnético. Essa força é dada pela equação vetorial

$$\vec{F}_m = q(\vec{v} \times \vec{B}), \qquad \text{(Eq. 12.1)}$$

onde q é a carga da partícula.

A Fig. 12.4(a) mostra o que acontece quando o portador é um elétron. Quando o portador é um buraco, a situação está representada na Fig. 12.4(b).

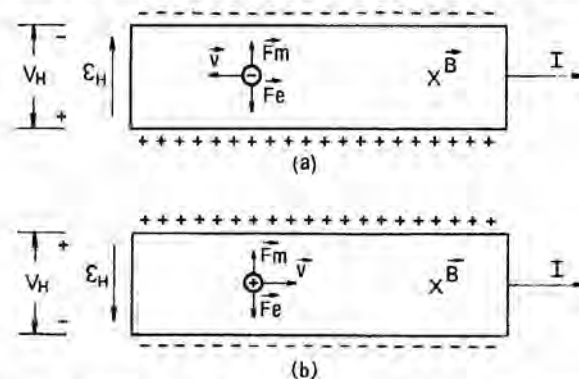



Figura 12.4 Efeito Hall para os dois tipos de portadores. (a) elétrons. (b) buracos. O sentido do campo magnético é para dentro do papel

Sob a ação do campo magnético, os portadores se deslocam para uma das faces do cristal. Surge então um campo elétrico transversal, ε_H, produzido pelo desequilíbrio de cargas. Em equilíbrio, a força aplicada ao portador pelo campo magnético, F_m, é igual à força aplicada pelo campo elétrico transversal, F_e. Para a geometria das Figs. 12.3 e 12.4, podemos escrever

$$F_m = qvB; \qquad \text{(Eq. 12.2)}$$

$$F_e = q\varepsilon_H. \qquad \text{(Eq. 12.3)}$$

Assim, em equilíbrio temos

$$vB = \varepsilon_H. \qquad \text{(Eq. 12.4)}$$

Por outro lado, chamando de J a densidade de corrente e de a a concentração de portadores, temos

$$J = qav. \qquad \text{(Eq. 12.5)}$$

Assim, temos (Fig. 12.3)

$$v = \frac{J}{qa} = \frac{I/A}{qa} = \frac{I}{qaht}. \qquad \text{(Eq. 12.6)}$$

Em conseqüência, temos

$$\varepsilon_H = vB = \frac{I}{qaht}B. \qquad \text{(Eq. 12.7)}$$

A diferença de potencial que aparece entre a face superior e a face inferior do cristal é dada por

$$V_H = \varepsilon_H h = \frac{1}{qa}\frac{IB}{t}$$

ou

$$V_H = R_H \frac{IB}{t}, \qquad \text{(Eq. 12.8)}$$

onde $R_H = 1/qa$ é chamado de *constante de Hall* do material considerado.

Quando os portadores são todos elétrons (carga $-q$, concentração n), podemos escrever

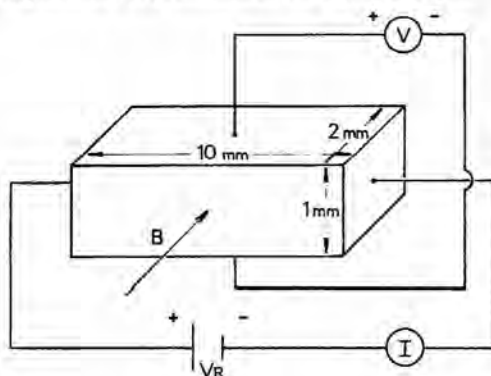
$$R_H = -\frac{1}{qn}. \qquad \text{(Eq. 12.9)}$$

Quando os portadores são todos buracos, temos

$$R_H = \frac{1}{qp}. \qquad \text{(Eq. 12.10)}$$

As Eqs. 12.9 e 12.10 mostram que a polaridade da tensão V_H (que é chamada de *tensão de Hall*) depende do tipo de portador presente no cristal. O efeito Hall pode ser usado portanto para determinar se um semicondutor é tipo N ou tipo P.

EXERCÍCIOS

(*)Considere a experiência esquematizada na figura a seguir.

Sabendo que

$V_R = 0{,}5$ V;

$I = 10$ mA;

$V = -1$ V;

$B = 2 \times 10^{-3}\,T$.

Pede-se

a) o tipo dos portadores (elétrons ou buracos),
b) a resistividade do material,
c) a concentração dos portadores,
d) a mobilidade dos portadores.

BIBLIOGRAFIA

Wang, S., *Solid State Electronics* (New York: McGraw-Hill, 1966), Cap. 11.
Yariv, A., *Quantum Electronics* (New York: John Wiley, 1967), Cap. 17.
Chang, K. K. N., *Parametric and Tunnel Diodes* (New Jersey: Prentice Hall, 1964).
Blatt, F. J., *Physics of Electronic Conduction in Solids* (New York: McGraw-Hill, 1968), Cap. 8.

APÊNDICE A **Teorema de Bloch**

O teorema de Bloch diz que a solução mais geral da equação de Schroedinger para um elétron em um cristal é

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}\mu_{\vec{k}}(\vec{r}), \qquad \text{(Eq. A.1)}$$

onde $\mu_{\vec{k}}(\vec{r})$ é uma função com a mesma periodicidade espacial que a rede cristalina.

Prova: Consideremos o operador T_j, definido por

$$T_j F(\vec{r}) = F(\vec{r} + \vec{R}_j), \qquad \text{(Eq. A.2)}$$

onde $\vec{R_j}$ é o vetor de translação da rede, isto é

$$V(\vec{r}) = V(\vec{r} + \vec{R}_j).$$

Aplicando o operador T_j à Eq. 5.12, temos

$$T_j\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right]\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) + V(\vec{r})\psi_{\vec{k}}(\vec{r})\right\} = E_{\vec{k}}T_j\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$$

como

$$T_j[V(\vec{r})\psi_{\vec{k}}(\vec{r})] = V(\vec{r} + \vec{R}_j)T_j\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = V(\vec{r})T_j\psi_{\vec{k}}(\vec{r}).$$

temos

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2[T_j\psi_{\vec{k}}(\vec{r})] + V(\vec{r})[T_j\psi_{\vec{k}}(\vec{r})] = E_{\vec{k}}[T_j\psi_{\vec{k}}(\vec{r})].$$

Assim, a função $T_j\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ satisfaz à mesma equação que a função $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ (Eq. 5.12), Nesse caso, $T_j\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ só pode diferir de $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ por um fator constante. Vamos chamar esse fator constante de a_j. Assim, temos

$$T_j\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \psi_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}_j) = a_j\psi_{\vec{k}}(\vec{r}). \qquad \text{(Eq. A.3)}$$

Vamos fazer

$$a_j = e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_j}, \qquad \text{(Eq. A.4)}$$

onde $\vec{k}$ é um vetor complexo. Trata-se de uma maneira perfeitamente geral de escrever a_j.

Consideremos agora a aplicação sucessiva de dois operadores T:

$$T_jT_i\psi_{\vec{k}}(r) = T_ja_i\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = a_ja_i\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot(\vec{R}_i+\vec{R}_j)}\psi_{\vec{k}}(\vec{r}). \qquad \text{(Eq. A.5)}$$

Como a aplicação sucessiva de dois operadores T corresponde à translação de um vetor igual à soma dos vetores de translação individuais, a Eq. A.5 mostra por que escolhemos para a_j a forma da Eq. A.4. Vemos também que é preciso que $\vec{k}$ seja um vetor real, caso contrário a função de onda cresceria indefinidamente com a distância ou seria atenuada rapidamente.

Vamos agora definir uma função $\mu_{\vec{k}}(\vec{r})$ do seguinte modo:

$$\mu_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}}\psi_{\vec{k}}(\vec{r}). \qquad \text{(Eq. A.6)}$$

Usando as Eqs. A.2, A.3 e A.4, temos

$$\begin{aligned} T_j\mu_{\vec{k}}(\vec{r}) &= \mu_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}_j) = T_j[e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}}\psi_{\vec{k}}(\vec{r})] = \\ &= e^{-i\vec{k}(\vec{r}+\vec{R}_j)}T_j\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{-i\vec{k}(\vec{R}+\vec{R}_j)}e^{i\vec{k}\vec{R}_j}\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \\ &= e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}}\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \mu_{\vec{k}}(\vec{r}). \end{aligned} \qquad \text{(Eq. A.7)}$$

Assim, a função $\mu_{\vec{k}}(\vec{r})$ tem a periodicidade da rede cristalina, isto é, $\mu_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}_j) = \mu_{\vec{k}}(\vec{r})$. Multiplicando os dois membros da Eq. A.6 por $\exp(i\vec{k}\cdot\vec{r})$, temos finalmente

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}\mu_{\vec{k}}(\vec{r}) \qquad \text{(Eq. A.8)}$$

o que completa a prova do teorema de Bloch.

APÊNDICE B Experiências em semicondutores

O desenvolvimento da física dos semicondutores deve-se sem dúvida a um exaustivo trabalho de pesquisa experimental, que prossegue até hoje em laboratórios de todo o mundo.

Julgamos importante que o estudante se familiarize desde cedo com as técnicas experimentais, utilizadas para investigar o comportamento dos semicondutores. Por esse motivo, decidimos apresentar neste apêndice uma lista de referências a experiências simples em semicondutores. Essas experiências poderão ser usadas, a critério do professor, para ilustrar e/ou expandir os conceitos teóricos desenvolvidos nesta obra.

REFERÊNCIAS

1. James F. Gibbons, *Semiconductor electronics*, McGraw-Hill, 1966.
2. R. B. Adler, A. C. Smith e R. L. Longini, *Introduction to Semiconductor Physics*, SEEC. Vol. 2, John Wiley, 1964. Este livro contém um apêndice dedicado exclusivamente a experiências de laboratório
3. Hilton A. Mello e E. Intrator, *Dispositivos semicondutores*, Ao Livro Técnico, 1972

EXPERIÊNCIAS

Experiência 1. Ilustração do crescimento de um cristal utilizando blocos cúbicos de madeira ou papel. Ref. 1. p. 58.

Experiência 2. Ilustração da estrutura de cristais utilizando bolas furadas e hastes cilíndricas. Ref. 1. p. 59.

Experiência 3. Determinação da freqüência crítica, f_c, na qual um cristal começa a absorver energia de um feixe de luz monocromática (*photoelectric threshold*). Ref. 1. p. 92.

Experiência 4. Estudo do fenômeno da fotocondutividade, ou seja, da variação da condutividade de um material semicondutor em função do fluxo luminoso incidente. Ref. 1. p. 93.

Experiência 5. Ilustração do fenômeno de luminescência em um cristal. Ref. 1. p. 94.

Experiência 6. Verificação do tipo de semicondutor (P ou N) para materiais fortemente dopados. Toca-se o cristal com uma ponta aquecida e observa-se a leitura de um voltímetro de alta impedância ligado entre essa ponta e um outro ponto do cristal. Ref. 1. p. 87.

Experiência 7. Experiência de Shockley-Haynes. Essa experiência permite medir as correntes de deriva e difusão e verificar experimentalmente a relação de Einstein ($D/\mu = kT/q$). Ref. 1. p. 120, 143.

Experiência 8. Medida da condutividade de uma amostra de germânio intrínseco, em função da temperatura. Essa experiência permite medir o coeficiente de temperatura de σ e também estimar a energia necessária para criar um par elétron-buraco. Ref. 1. p. 143.

Experiência 9. Efeito Hall – Experiência extremamente interessante, que além de suas aplicações industriais (medida de corrente), permite uma confirmação da existência de dois tipos de portadores de carga. Ref. 1. p. 126 e Ref. 2. pp. 195, 205.

Experiência 10. Ilustração dos fenômenos de recombinação e tempo de vida de portadores. Ref. 1. p. 147.

Experiência 11. Medida da capacitância de uma junção *PN* em função da tensão inversa aplicada. Ref. 1. p. 180.

Experiência 12. Curva característica de um diodo – Experiência que tem como finalidade levantar experimentalmente a curva característica de um diodo. Ref. 3. pp. 38, 39 e 40.

Experiência 13. Medida da condutividade de um semicondutor em função da temperatura (experiência mais elaborada que a experiência 8). Ref. 2. p. 198.

Experiência 14. Produção de pares elétron-buraco e largura da faixa proibida de energias (*energy gap*). Ref. 2. p. 213.

Experiência 15. Medida da mobilidade dos portadores em um material semicondutor. Ref. 2. p. 222.

Experiência 16. Construção de um diodo tipo *liga* (*alloy*). Ref. 2, p. 230.

Respostas e sugestões para os exercícios propostos

CAPÍTULO 1

1.1. $a_0 = 5{,}292 \times 10^{-11}$m.

1.2. Use a Fig. 1.5 e a Eq. 1.10.

CAPÍTULO 2

2.5. É possível provar que a seguinte relação é válida para um polinômio de Hermite de ordem n:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} H_n^2(\xi)\, e^{-\xi^2}\, d\xi = 2^n \cdot n!\pi$$

CAPÍTULO 4

4.1. *a*) $5{,}8 \times 10^{22}$

b) 4,07 Å.

4.4. 109° 28′.

4.7. *Observe que* [100], [010] *e* [001] *são direções de "mesmo tipo".*

O plano $(01\bar{1})$ contém as direções [100], [011] e [111].
O plano $(\bar{1}01)$ contém as direções [010], [101] e [111].
O plano $(1\bar{1}0)$ contém as direções [001], [110] e [111].

CAPÍTULO 7

7.3. Considere o recipiente onde está o gás suficientemente raso e portanto despreze a variação da energia potencial. Nesse caso

$$E = \frac{m}{2}(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2) = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m}.$$

CAPÍTULO 8

8.1. a) $p_n = \dfrac{-N_D \pm \sqrt{N_D^2 + n_i^2}}{2}$.

b) $\simeq 10\%$.

8.6. Use o método gráfico de Schockley.

a) Nível de Fermi cerca de $8\,kT$ acima de E_2.

b) $n \cong 2 \times 10^{14}\,\text{cm}^{-3}$.

c) Desprezível.

CAPÍTULO 9

9.4. $v_d = 4 \times 10^3$ cm/s.

$D = 10\,\text{cm}^2/\text{s}$.

9.6. Suponha $N_A \gg n_i$ e verifique depois se a suposição é correta.
$p = 3{,}3 \times 10^{14}\ \text{cm}^{-3}$.
$n = 1{,}7 \times 10^{12}\ \text{cm}^{-3}$.

9.8. Prove que

$$\frac{d\sigma}{dT} = \sigma \frac{qE_G}{2\,k\,T^2}.$$

9.9. Prove primeiro que

$$v(t) = -\frac{q\varepsilon_0}{im^*\omega}\left[e^{i\omega t} - e^{i\omega t_0}\right].$$

CAPÍTULO 10

10.1. a) $5{,}0 \times 10^{-5}$ cm.
b) $9{,}9 \times 10^{-5}$ cm.

10.3. a) $V_1 = 0{,}017$ V;
$V_2 = 9{,}983$ V.
b) 10 μA.

CAPÍTULO 12

a) Elétrons.
b) 1 Ω -cm.
c) $6{,}2 \times 10^{15}\ \text{cm}^{-3}$.
d) $10^3\ \text{cm}^2/\text{V·s}$.